目　　录

第五章　本征值问题．数学物理函数

第六章　碰撞过程

第七章　解波动方程的近似方法

第八章　矩阵和算符．微扰理论

第九章　角动量和自旋

第十章　具有自旋的全同粒子

习　题

第一章　自由粒子的波函数①

§1. 波和粒子的联系

一个具有能量 E 和动量 $\boldsymbol{p}$ 的粒子能以如下方式与一个波 $A\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)]$ 相联系 ($\boldsymbol{k}=(2\pi/\lambda)\boldsymbol{n}$ 为波矢，$\boldsymbol{n}$ 为波的法线).

对于光量子

$$E=h\omega,\quad \boldsymbol{p}=h\boldsymbol{k} \tag{1.1}$$

关系式成立. 它们是相对论性不变式. 此外还有关系式

$$\left.\begin{aligned} |\boldsymbol{k}|\equiv k=\frac{\omega}{c},\qquad & |\boldsymbol{p}|\equiv p=\frac{E}{c} \\ \boldsymbol{k}^2=\frac{\omega^2}{c^2},\qquad & \boldsymbol{p}^2=\frac{E^2}{c^2} \end{aligned}\right\}. \tag{1.2}$$

根据相对论性质点力学,我们有公式:

$$\frac{E}{c}=\sqrt{\boldsymbol{p}^2+m^2c^2}\quad (m=\text{静质量}), \tag{1.3}$$

$$E=\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}},\quad \boldsymbol{p}=\frac{m\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}}. \tag{1.4}$$

其中,[1.3]式是由[1.4]式导出的. 根据力学的普遍公式

$$\mathrm{d}E=\boldsymbol{v}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{p},\ \text{或(用分量的形式)}\quad v_i=\frac{\partial E}{\partial p_i}, \tag{1.5}$$

---

① 1a　在本讲义中,我们用符号 h 代表 1.05×10^{-34} 焦耳·秒. 在较早期的文献中,这个量通常用 $\hbar$ 来表示.

1b　通常将略去积分限 $-\infty$ 和 $+\infty$.

我们也能从[1.3]式导出[1.4]式:

$$\left.\begin{aligned}
&v_i=\frac{\partial E}{\partial p_i}=c\frac{p_i}{\sqrt{p^2+m^2c^2}}=c^2\frac{p_i}{E}\text{①}\\
&\frac{v^2}{c^2}=\frac{c^2p^2}{E^2},\ 1-\frac{v^2}{c^2}=1-\frac{c^2p^2}{E^2}=\frac{m^2c^4}{E^2}\\
&\frac{v^2}{c^2}=\frac{p^2}{p^2+m^2c^2},\quad p^2\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)=m^2v^2
\end{aligned}\right\}. \qquad [1.6]$$

也可将[1.5]式和[1.6]式结合起来而给出关系式

$$(1/c^2)E\mathrm{d}E=\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

德布罗意的思想是：[1.1]式对于实物粒子也应该是正确的，但在实物粒子的情况中，[1.2]式必须以下式来代替

$$\frac{\omega}{c}=\sqrt{k^2+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}},\quad \frac{\omega^2}{c^2}=k^2+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}. \qquad [1.7]$$

此式由[1.1]式和[1.3]式导出. 对于光($m=0$)来说，我们又得到[1.2]式.

将[1.1]式代入[1.5]式，得

$$v_i=\frac{\partial\omega}{\partial k_i}; \qquad [1.8]$$

即，粒子的速度＝粒子所联系的波的群速度. 从[1.1]式和[1.6]式得到$|\boldsymbol{v}|=c^2(k/\omega)$；因此，对于相速度 u，有

$$u=\frac{\omega}{k}=\frac{c^2}{v}. \qquad [1.9]$$

由于 $v<c$，所以 $u>c$.

§2. 波函数和波动方程

a. 平面波的叠加. 波包

① 此式原书有误，已改正.——中译者注

最普遍的波包具有如下形式①

$$\psi(\boldsymbol{x}, t)=\iiint A(k_1, k_2, k_3)\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)]\mathrm{d}k_1\mathrm{d}k_2\mathrm{d}k_3, \quad [2.1]$$

式中 ω 现在由[1.7]式给出.

这一波函数 ψ 满足相对论性标量波动方程

$$\left(\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi(\boldsymbol{x}, t)=\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi(\boldsymbol{x}, t), \quad [2.2]$$

正如将[2.1]式代入[2.2]式会看到的那样. 由于[1.7]式, 于是波动方程同样被满足. 所以, 我们也能写出

$$\frac{\partial}{\partial x_l}\sim ik_l, \quad \frac{\partial}{\partial t}\sim -i\omega. \quad [2.3]$$

这些对应关系, 和[1.1]式一起, 给出时间和空间的微分算符与经典量 $\boldsymbol{p}$ 和 E 间的重要联系:

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_l}\sim p_l, \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sim E. \quad [2.4]$$

这些关系构成经典力学量与波动力学算符间转化的关键.

b. 过渡到非相对论性近似

在力学中, 对于 $v\ll c(c\to\infty)$ 和 $p\ll mc$ 的情况, 我们有

$$\frac{E}{c}=\sqrt{p^2+m^2c^2}\sim mc\left(1+\frac{1}{2}\frac{p^2}{m^2c^2}+\cdots\right)$$
$$=\frac{1}{c}\left(mc^2+\frac{1}{2}\frac{p^2}{m}+\cdots\right). \quad [2.5]$$

由[1.7]式我们也得到

$$\omega=\frac{E}{\hbar}=\frac{mc^2}{\hbar}+\frac{\hbar}{2m}k^2+\cdots \quad [2.6]$$

(式中 $E=mc^2+E_{动}$, $E_{动}=p^2/2m$). 我们定义

① 参见 W. Pauli, *Lecture in Physics: Optics and the Theory of Electrons* (M. I. T. Press, Cambridge, Mass. 1972). [中译本: 泡利物理学讲义(1973年版), 第二卷, 光学和电子论, 洪铭熙译, 人民教育出版社出版. ——中译者注]

$$\omega' = \frac{h}{2m}k^2, \qquad [2.7]$$

即

$$\omega = \frac{mc^2}{h} + \omega', \qquad [2.8]$$

和

$$\psi'(\boldsymbol{x}, t) = \iiint A(\boldsymbol{k}) \exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \omega' t)] \mathrm{d}^3 k, \qquad [2.9]$$

由此，

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \exp\left[-\frac{imc^2}{h}t\right]\psi'(\boldsymbol{x}, t). \qquad [2.10]$$

代入[2.2]式，给出，

$$\nabla^2\psi' + \frac{m^2c^2}{h^2}\psi' + 2\frac{im}{h}\frac{\partial\psi'}{\partial t} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi'}{\partial t^2} = \frac{m^2c^2}{h^2}\psi',$$

从而导出非相对论性波动方程①

$$\nabla^2\psi' + i\frac{2m}{h}\frac{\partial\psi'}{\partial t} = 0 \qquad [2.11]$$

除了虚系数外，此式对应于热传导方程．虚系数保证了时间无特殊方向；在 $t\to -t$，$\psi'\to\psi'^*$ 的变换中，[2.11]式为不变式．因此，$\psi^*\psi$ 保持不变②．

今后我们将总是用这里引进的带撇的量来计算；然而，为了简化，将省去"撇"的符号．ω 和 ω' 两个量只相差一常数；然而，这不是一个本质的差别，因为在波动力学中，只有频率差才是重要的．

§3. 测不准原理

在波的运动学中，我们不能在指明波的位置的同时指明精确

---

① 此式按德文原本写出．英译本中，此式左端尚有一项 $-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi'}{\partial t^2}$．实际上，对于非相对论性近似，$c$ 看作 ∞，该项应略去．——中译者注

② 以后我们将看到，物理上可测量的量并非波函数 ψ，而只是几率密度 $\psi^*\psi$．

的波长.的确,人们只能对限制于空间局部区域的波包的情况来谈论波的位置. 当波包变得更集中时, 包含在傅里叶谱中的不同的波长的数目增加. 推测形式为 $\Delta k_i \Delta x_i >$常数的关系是合理的, 我们现在要定量地导出这一关系. 为了简化, 我们只对一维情况进行计算;可直接推广到三维情况.

我们考察一个在一定时刻 t 的波包 [2.1], 并令此时刻为 $t=0$. 如在傅里叶积分变换中所要求的, 可将[2.1]式写成对于 x 和 k 是对称的形式:

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int A(k)\exp[ikx]\mathrm{d}k, \qquad [3.1]$$

$$A(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \psi(x)\exp[-ikx]\mathrm{d}x. \qquad [3.2]$$

由于这些公式的对称性,当进行下列诸代换时

$$\updownarrow \begin{matrix} \psi & A & x & k & i \\ A & \psi & k & x & -i \end{matrix} \qquad [3.3]$$

所有的方程仍然保持其正确性.此外,著名的帕塞瓦耳(Parseval)公式成立

$$N=\int \psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\int A^*(k)A(k)\mathrm{d}k. \qquad [3.4]$$

a. 函数和算符的平均值. 归一化

对于一个归一化的波包,按定义,归一化积分N等于1. 一个无限广延的平面波给出 $N=\infty$, 因此, 它不能被归一化. 我们定义函数F的平均值等于下列诸量:

$$\bar{F}(x)=\frac{\int F(x)\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x}{\int \psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x}, \quad \bar{F}(k)=\frac{\int F(k)A^*(k)A(k)\mathrm{d}k}{\int A^*(k)A(k)\mathrm{d}k}.$$

在这些公式中,量 $\psi^*\psi$ 和 A^*A 具有密度的意义. 后面, 将更好地证实这一诠释.

今后，我们总是假定，$\psi(x)$和 $A(k)$是归一化的：

$$\bar{F}(x)=\int F(x)\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x, \tag{3.5}$$

$$\bar{F}(k)=\int F(k)A^*(k)A(k)\mathrm{d}k. \tag{3.6}$$

利用转化关键[2.3]式①，我们由函数 $F(k)$得到算符 $F(-i(\partial/\partial x))$. 如何构成这样一个算符的平均值，即，当计算平均值时，让它作用在什么函数上，这一问题只能通过更详尽的考虑才能决定. 其结果为

$$\bar{F}(k)=\int\psi^*(x)\left[F\left(-i\frac{\partial}{\partial x}\right)\cdot\psi(x)\right]\mathrm{d}x, \tag{3.7}$$

$$\bar{F}(x)=\int A^*(k)\left[F\left(+i\frac{\partial}{\partial k}\right)\cdot A(k)\right]\mathrm{d}k. \tag{3.8}$$

由于[3.3]式，[3.8]式是[3.7]式的结果，反之亦然. 我们对 F ＝多项式的情况来证明[3.8]式：

1. $F(x)=x$.

$$\begin{aligned}\bar{x}&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int x\psi^*\mathrm{d}x\cdot\int A(k)\exp[ikx]\mathrm{d}k\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\psi^*\mathrm{d}x\cdot\int A(k)\left[\left(-i\frac{\partial}{\partial k}\right)\exp[ikx]\right]\mathrm{d}k\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int i\frac{\partial A}{\partial k}\mathrm{d}k\cdot\int\psi^*\exp[ikx]\mathrm{d}x\\&=\int A^*(k)\left[\left(i\frac{\partial}{\partial k}\right)A(k)\right]\mathrm{d}k.\end{aligned}$$

2. $F(x)=x^n$. 此处的证明是类似的，只是包含 n 次分部积分. 从而，对多项式证明了[3.8]式. 也不难对整函数证明这一公式（利用傅里叶积分定理）.

---

① 英译本误为[3.3]式.——中译者注

b. 测不准关系

我们定义

$$(\delta x)^2=(x-\bar{x})^2,\quad (\delta k)^2=(k-\bar{k})^2. \qquad [3.9]$$

为了简单起见，令

$$\bar{x}=0 \text{ 和 } \bar{k}=0,$$

借助于单纯的坐标平移即可达到这一要求。利用[3.7]和[3.8]式，同时实行分部积分，我们得到

$$\overline{x^2}=\int A^*(k)\left[\left(-\frac{\partial^2}{\partial k^2}\right)A(k)\right]\mathrm{d}k=+\int\frac{\partial A^*}{\partial k}\cdot\frac{\partial A}{\partial k}\mathrm{d}k, \qquad [3.10]$$

$$\overline{k^2}=\int \psi^*(x)\left[\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x)\right]\mathrm{d}x=+\int\frac{\partial \psi^*}{\partial x}\cdot\frac{\partial \psi}{\partial x}\mathrm{d}x. \qquad [3.11]$$

现在我们能够定量地确定测不准关系．为了计算 $\overline{x^2}\cdot\overline{k^2}$，我们从下列不等式着手

$$D\equiv\left|\frac{x}{2\overline{x^2}}\psi(x)+\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2\geqslant 0;$$

$$D=\frac{x^2}{4(\overline{x^2})^2}\psi\psi^*+\frac{x}{2\overline{x^2}}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)+\frac{\partial\psi}{\partial x}\cdot\frac{\partial\psi^*}{\partial x}$$

$$=\frac{1}{4}\left(\frac{x}{\overline{x^2}}\right)^2\psi\psi^*+\frac{1}{2}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x}{\overline{x^2}}\psi\psi^*\right)-\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{\overline{x^2}}\psi\psi^*+\frac{\partial\psi}{\partial x}\cdot\frac{\partial\psi^*}{\partial x}$$

$$=\frac{1}{4}\cdot\frac{1}{(\overline{x^2})^2}(x^2-2\overline{x^2})\psi\psi^*+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\cdot\left(\frac{x}{\overline{x^2}}\psi\psi^*\right)+\frac{\partial\psi}{\partial x}\cdot\frac{\partial\psi^*}{\partial x},$$

由此，并利用[3.11]，[3.5]式和 $\psi(\infty)\to 0$，得到

$$0\leqslant\int D(x)\mathrm{d}x=-\frac{1}{4\overline{x^2}}+\overline{k^2}.$$

于是，得到 $\overline{k^2}\cdot\overline{x^2}\geqslant\frac{1}{4}$，或，更普遍地，$\overline{(\delta k)^2}\,\overline{(\delta x)^2}\geqslant\frac{1}{4}$. 利用

$$\Delta k\equiv+\sqrt{\overline{(\delta k)^2}},\ \Delta x\equiv+\sqrt{\overline{(\delta x)^2}},\ \Delta p\equiv\sqrt{\overline{(\delta p)^2}},$$

则由单纯的波动学定律得到测不准关系：

$$\Delta k\cdot\Delta x\geqslant\frac{1}{2},\quad \Delta p\cdot\Delta x\geqslant\frac{\hbar}{2}. \qquad [3.12]$$

[3.12]式中的等号只当 $D=0$ 时才适用，此时

$$\frac{\partial\psi}{\partial x}=-\frac{x}{2\overline{x^2}}\psi.$$

此微分方程的解为一高斯分布，当被归一化时，为

$$\psi(x)=\sqrt[4]{\frac{2a}{\pi}}\cdot\exp[-ax^2];\quad a=\frac{1}{4\overline{x^2}}. \qquad [3.13]$$

于是，具有高斯分布的波包与最小测不准性相联系．这样一个波包的频谱分析给出仍为高斯分布的频谱：

$$A(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot\sqrt[4]{\frac{2a}{\pi}}\int\exp[-ax^2-ikx]\mathrm{d}x \quad (\text{由[3.2]式})$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot\sqrt[4]{\frac{2a}{\pi}}\int\exp\left[-a\left(x+\frac{ik}{2a}\right)^2\right]\mathrm{d}x\cdot\exp\left[-\frac{k^2}{4a}\right]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot\sqrt[4]{\frac{2a}{\pi}}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{a}}\cdot\exp\left[-\frac{k^2}{4a}\right],$$

$$A(k)=\frac{1}{\sqrt[4]{2\pi a}}\cdot\exp\left[-\frac{k^2}{4a}\right]. \qquad [3.14]$$

c. 波包随时间的变化($t\neq0$)

我们从与时间相关形式的傅里叶积分表示着手(在[3.1]式中，$kx\to(kx-\omega t)$，ω 由[2.7]式给出)：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int A(k)\exp\left[i\left(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right]\mathrm{d}k$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int A(k,t)\exp[ikx]\mathrm{d}k, \qquad [3.15]$$

$$A(k,t)=A(k)\cdot\exp\left[-i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\psi(x,t)\exp[-ikx]\mathrm{d}x, \qquad [3.16]$$

$$|A(k,t)|^2=|A(k)|^2. \qquad [3.17]$$

现在我们选取 $A(k)$ 为高斯分布[3.14]：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\cdot\frac{1}{\sqrt[4]{2\pi a}}\cdot\int\exp\left[-\frac{k^2}{4a}\left(1+\frac{2ihat}{m}\right)+ikx\right]\mathrm{d}k.$$

用

$$\alpha(t)=\frac{a}{1+2ihat/m}$$

和

$$\int\exp\left[-\frac{k^2}{4\alpha}+ikx\right]\mathrm{d}k=\int\exp\left[-\frac{1}{4\alpha}(k-2ix\alpha)^2\right]\mathrm{d}k$$

$$\times\exp[\alpha x^2]=2\sqrt{\alpha\pi}\exp[-\alpha x^2],$$

得到

$$\psi(x,t)=\sqrt[4]{\frac{2a}{\pi}}\cdot\frac{1}{\sqrt{1+2ihat/m}}\cdot\exp[-\alpha(t)x^2]. \qquad [3.18]$$

(对于 $t=0$, 我们又得到[3.13]式。)于是

$$|\psi(x,t)|^2=\sqrt{\frac{2a}{\pi}}\cdot\frac{1}{\sqrt{1+(2aht/m)^2}}\cdot\exp[-(\alpha+\alpha^*)x^2];$$

$$\alpha+\alpha^*=\frac{2a}{1+(2aht/m)^2}=\beta. \qquad [3.19]$$

由概率论我们得知高斯分布的方差:

$$W(x)=|\psi(x)|^2=\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\exp[-\beta x^2] \quad 意味着 \quad \overline{x^2}=\frac{1}{2\beta}.$$

由此,我们得到

$$(\Delta x)^2=\overline{x^2}=\frac{1}{4a}\left[1+\left(\frac{2aht}{m}\right)^2\right].$$

同理, 得到$(\Delta k)^2=a$, 这里用到由[3.14]式给出的$|A(k)|^2$。所以,

$$(\Delta x)^2=\frac{1}{4(\Delta k)^2}+\frac{h^2(\Delta k)^2}{m^2}t^2. \qquad [3.20]$$

运动的波包的方差随时间 t 平方地增大.这不仅对高斯分布成立,它也是普遍正确的. 与[3.10]式相似, 利用 $A(k,t)$, 于是

$$\overline{x^2}=+\int\frac{\partial A^*(k,t)}{\partial k}\cdot\frac{\partial A(k,t)}{\partial k}\,\mathrm{d}k=\int\left|\frac{\partial A(k,t)}{\partial k}\right|^2\mathrm{d}k, \qquad [3.21]$$

由[3.16]式我们看到

$$\frac{\partial A(k,t)}{\partial k}=\exp\left[-i\frac{hk^2}{2m}t\right]\cdot\left(\frac{\partial A(k)}{\partial k}-i\frac{hk}{m}t\cdot A(k)\right). \qquad [3.22]$$

所以，

$$\begin{aligned}\overline{x^2}(t)&=\int\left|\frac{\partial A}{\partial k}-i\frac{hk}{m}t\cdot A\right|^2\mathrm{d}k\\&=\int\frac{\partial A^*}{\partial k}\cdot\frac{\partial A}{\partial k}\,\mathrm{d}k+\frac{iht}{m}\int k\left(A^*\frac{\partial A}{\partial k}-A\frac{\partial A^*}{\partial k}\right)\mathrm{d}k\\&\quad+\frac{h^2}{m^2}\overline{k^2}\,t^2\end{aligned} \qquad [3.23]$$

§4. 波包和质点力学．几率密度

我们引入动量 p 来代替波数 k: $p=hk$.

$$\left.\begin{aligned}\varphi(p,t)&=\frac{1}{\sqrt{h}}A(k,t)\\\varphi(p)&=\frac{1}{\sqrt{h}}A(k)\end{aligned}\right\}, \qquad [4.1]$$

$$|\varphi(p,t)|^2\mathrm{d}p=|A(k,t)|^2\mathrm{d}k. \qquad [4.2]$$

则[3.2]，[3.1]和[3.4]式分别以下列诸式来代替:

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int\psi(x)\exp\left[-\frac{i}{h}px\right]\mathrm{d}x, \qquad [4.3]$$

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int\varphi(p)\exp\left[\frac{i}{h}px\right]\mathrm{d}p, \qquad [4.4]$$

和

$$\int|\varphi(p)|^2\mathrm{d}p=\int|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=1. \qquad [4.5]$$

我们首先注意，波包与质点力学间的关系只能是统计性质的．一种测量装置定义一个态．对于一个在时刻 t 的态，波函数 $\psi(x)$

和 $\varphi(p)$ 是已知的．然而，这些并非物理上可测量的量；我们只能测定在 x 和 $x+\mathrm{d}x$ 之间发现粒子的几率 $W(x)\mathrm{d}x$．我们称 $W(x)$ 为几率密度；我们可以用它来表述波动力学的基本假设：

$$W(x)=|\psi(x)|^2,$$

在 x 和 $x+\mathrm{d}x$ 之间的几率为

$$W(x)\mathrm{d}x; \qquad [4.6]$$

$$W(p)=|\varphi(p)|^2,$$

在 p 和 $p+\mathrm{d}p$ 之间的几率为

$$W(p)\mathrm{d}p. \qquad [4.7]$$

我们可用这些函数将期待值写成(与[3.5]和[3.6]式对比)：

$$\bar{f}(x)=\langle f(x)\rangle_a=\int f(x)W(x)\mathrm{d}x, \qquad [4.8]$$

$$\bar{g}(p)=\langle g(p)\rangle_a=\int g(p)W(p)\mathrm{d}p. \qquad [4.9]$$

引入不可测量的量 ψ 和 φ 的原因在于，这些量遵从简单的数学定律，特别是线性叠加原理：若 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 代表可能的态，则由 $c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x)$ 描述的态也是可能的．另一方面，几率(正如光强度)不是加性的(交叉项)．它们显示出熟知的干涉效应，而波动力学实际上是以干涉效应的观察为基础的．

特别值得注意的是理论对于 $W(x)$ 和 $W(p)$ 的完全对称；即，当进行下列代换时，所有的公式仍保持正确：

$$\updownarrow \begin{matrix} p & x & i \\ x & p & -i. \end{matrix} \qquad [4.10]$$

对称的完全性来源于这一事实：作为实量的几率并不由于取其复共轭而改变．

“引入直观图象而破坏这一对称性的任何臆测都不用去认真对待．”爱因斯坦也有这种意见．他相信这种统计的描述的确应该

是正确的，但并不完备. 然而，迄今尚未发现扩充这一理论的可能性，纵然没有给出扩充这一理论的不可能性的证据[A-1].①

§5. 测量装置. 几个例子的讨论

我们若考察通过光阑上两个小孔的粒子流，则我们发现，在光阑后面发现粒子的几率是一个象光学中那样的典型的衍射图样(图 5.1). 几率的干涉与强度无关，即，与粒子流的密度无关. 它只取决于孔的位置；该两孔和它们关联的波函数一起为我们定义了一个"态". 通过测定粒子的位置和动量，我们只能决定由实验装置所确定的态的统计性质. 这一统计描述避免了波动力学和质点力学间的矛盾；然而，它导致了作为波动力学特征的测不准性. 例如，我们若考察一个单个的自由原子所代表的"态"，则我们发现，这个态被位置或动量的每次测量所完全改变. 例如，若我们测定粒子的位置，则在此过程中将传递给粒子一个不可确定的动量；这将使得我们不可能准确地预示较后时刻粒子的位置. 虽然能通过连续测量（把经典力学定律应用于这些测量）而愈来愈精确地确定天体轨道(图 5.2)，然而对基本粒子的每一测量，都使粒子脱离轨道（图 5.3)；即，先前位置的测量



图 5.1



图 5.2



图 5.3

① 注释[A-1]—[A-5]见附录.

对于尔后轨道的确定是无用的.

不论设想一些什么样的实验装置和测量，总存在一个由海森伯测不准关系[3.12]所给出的不确定性:

$$(\Delta p)^2 \cdot (\Delta x)^2 \geqslant \frac{\hbar^2}{4}.$$

(在 § 3 中，这一关系曾完全由波的运动学导出.)按照玻尔的说法，若两个量，譬如 p 和 x，满足一个测不准关系，则称该二量是并协的．例如，E 和 t 也是并协的.

现在我们要通过三个例子来表明，实际上测不准关系是怎样起作用的．首先，我们能够说，即使对一个单独过程，能量和动量守恒定律在目前也被认为在实验上和理论上都是牢固地确立了的．同样，强度对干涉现象无影响也是确证无疑的.

α．例 1：用显微镜测定位置

从显微镜理论中我们知道，用显微镜测定位置时必须用会聚光（图 5.4)．这样的位置测定的精确度极限由阿贝正弦条件给出

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \varepsilon}.$$

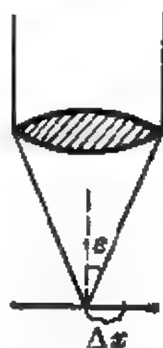


图 5.4

这样，只要让 λ 很小，在原则上我们能任意精确地测定 x．然而，我们必须要求显微镜经典地起作用．即，我们必须要求有大量光子，使得至少有一个光子必定被测量对象所散射；于是，我们能用宏观方法(眼睛、照相片，等)观察到这个光子．遗憾的是，因为不拆毁显微镜我们就不能确定光子在显微镜中走哪条路程，所以，由于散射，传递给测量对象一个不确定的动量．对光子有用的区域包含在 ε 角中．由此，利用

$$|p| = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda},$$

得出动量的不确定量为

$$\Delta p_x \sim \frac{h}{\lambda}\sin\varepsilon,$$

而且，实际上

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim h$$

成立.

b. 例 2：应用多普勒效应测定动量

我们令有限长度 L 的光波列射向欲测定其速度 v_x 的粒子(图 5.5)，而且，该波列将包含那样多的光子，以致其中必定有一个光子被粒子所散射. 我们设想，该光子沿负 x 方向接近粒子，并沿正 x 方向被散射，对此情况，我们来建立碰撞前后能量和动量的平衡：



图 5.5

动量 $$-\frac{h\nu}{c}+p_x=\frac{h\nu'}{c}+p'_x,\quad p'_x=p_x-\frac{h\nu}{c}-\frac{h\nu'}{c} \qquad [5.1]$$

能量 $$h\nu+E=h\nu'+E',\quad h\nu'=h\nu+E-E'. \qquad [5.2]$$

应用普遍关系(即使在相对论性理论中也成立)

$$\frac{\partial E}{\partial p_x}=v_x,\ \frac{\partial E'}{\partial p'_x}=v'_x, \qquad [5.3]$$

并将[5.2]式对 p_x 求导，我们得到

$$h\frac{\partial \nu'}{\partial p_x}=v_x-v'_x\cdot\frac{\partial p'_x}{\partial p_x}. \qquad [5.4]$$

由于 ν 已给定，[5.1]式对 p_x 的导数为

$$\frac{\partial p'_x}{\partial p_x}=1-\frac{h}{c}\frac{\partial \nu'}{\partial p_x}; \qquad [5.5]$$

将此结果代入[5.4]式，得到

$$h\frac{\partial \nu'}{\partial p_x}=v_x-v'_x\left(1-\frac{h}{c}\frac{\partial \nu'}{\partial p_x}\right)$$

或

$$h\frac{\partial \nu'}{\partial p_x}\left(1-\frac{v'_x}{c}\right)=v_x-v'_x. \qquad [5.6]$$

利用

$$\Delta\nu'=(\partial\nu'/\partial p_x)\cdot\Delta p_x$$

将上式用不确定量写出，我们得到

$$h\Delta\nu'=\frac{v_x-v'_x}{1-v'_x/c}\Delta p_x\sim(v_x-v'_x)\Delta p_x. \qquad [5.7]$$

该波列在一有限时间 T 内通过粒子；由于相互作用时间的限制，引起 ν' 的一个不确定量①

$$\Delta\nu'\sim\frac{1}{T}.$$

从而，

$$\Delta p_x\sim\frac{h}{(v_x-v'_x)T}. \qquad [5.8]$$

位置的不确定量起因于：因为不毁坏测量动量的装置，我们就不能确定在时间间隔 T 中何时粒子改变其速度：

$$\Delta x\sim(v_x-v'_x)T. \qquad [5.9]$$

与[5.8]式一起，给出

$$\Delta x\cdot\Delta p_x\sim h.$$

这是我们曾得到过的结果。

c. 例3：光的相干性

我们考察光射到具有双孔的光阑上的衍射实验（图 5.6）。为了发生干

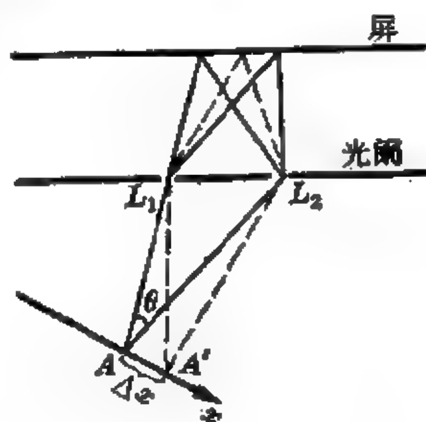


图 5.6

① 这一公式可根据，例如，所考虑的波包的傅里叶分析而得到。而且，它与能量的测不准关系 $\Delta E\cdot\Delta t\sim h$ 是等同的。

涉现象，经典波动理论要求光的相干性. 当我们用量子力学观点考察这一过程，并取单个发光原子作为光源时，情况是怎样呢？

屏上的干涉图样是一系列的明、暗带，它们取决于光程差

$$D=\frac{2\pi}{\lambda}(\overline{AL_2}-\overline{AL_1}). \qquad [5.10]$$

我们若想确定一个发射的光量子究竟通过光阑上的哪一个孔，那么，例如通过测定原子的反冲动量我们就能做到这一点. 为此目的，我们必须对原子在 x 方向上的动量了解到精确度：

$$\Delta p_x<2\frac{h}{\lambda}\sin\frac{\theta}{2}. \qquad [5.11]$$

由于原子的波性，这意味着位置的不确定性

$$\Delta x>\frac{h}{2}\cdot\frac{1}{\Delta p_x}>\frac{h}{2}\cdot\frac{\lambda}{2h\sin\theta/2}=\frac{\lambda}{4\sin\theta/2}. \qquad [5.12]$$

就我们所知，该原子也同样能处于位置 A'. 此时，光程差为

$$D'=\frac{2\pi}{\lambda}(\overline{A'L_2}-\overline{A'L_1}), \qquad [5.13]$$

而且有

$$D-D'=\frac{2\pi}{\lambda}\cdot2\sin\frac{\theta}{2}\cdot\Delta x>\pi. \qquad [5.14]$$

这意味着，一俟我们确定了光子通过哪一个孔，干涉图样就将消失. 测不准关系始终防止波和粒子描述间的矛盾.

§6. 经典统计学和量子统计学

在经典力学中，我们可以说，存在一个几率密度 $W(p,x)$，由此，通过积分，我们得到

$$W(p)=\int W(p,x)\mathrm{d}x,\quad \widetilde{W}(x)=\int W(p,x)\mathrm{d}p, \qquad [6.1]$$

然而，式中 $W(p)$ 和 $\widetilde{W}(x)$ 是不同的函数. 归一化与通常的相同：

$$\iint W(p,x)\mathrm{d}p\mathrm{d}x=1,\text{或}\int\widetilde{W}(x)\mathrm{d}x=1,\ \int W(p)\mathrm{d}p=1.$$

就这点来说，测量意味着几率的约化，即，$W(p,x)$分解为代表子系的几部分，这些子系的几率是加性的：

$$W(p,x)=g_1W_1(p,x)+g_2W_2(p,x)\quad(0<g<1),$$

当然，也有

$$W(p)=g_1W_1(p)+g_2W_2(p),$$
$$\widetilde{W}(x)=g_1\widetilde{W}_1(x)+g_2\widetilde{W}_2(x).$$

在经典力学中，我们能继续这一分解，直至辨认出x，p分别位于间隔$(x, x+\Delta x)$和$(p, p+\Delta p)$中为止，在此情况中，我们得到最简单的分布

$$\widetilde{W}(x)=0,\qquad \text{在间隔}(x,x+\Delta x)\text{之外},$$
$$W(p)=0,\qquad \text{在间隔}(p,p+\Delta p)\text{之外}.$$

这里，Δp和Δx之间绝对没有联系（不存在测不准关系：$h=0$）。然而，我们能推导一个关于几率随时间变化的公式，例如，对于具有统计分布的初始条件的自由质点：

$$x=x_0+vt=x_0+\frac{p}{m}t\qquad\left(v=\frac{p}{m}\right).$$

利用简化的假设

$$\overline{\delta x_0}=0,\ \overline{\delta x_0\delta p}=0,$$

我们从

$$\delta x=\delta x_0+\frac{t}{m}\delta p$$

得出

$$(\Delta x)^2=(\Delta x_0)^2+\frac{t^2}{m^2}(\Delta p)^2.$$

这正是曾在量子理论基础上导出的公式[3.20]．仅有的区别在于：

在经典力学中Δp和Δx之间没有联系.

经典力学与量子力学之间的具体区别为

1. 测不准关系,和
2. 几率的干涉.

正是这两点导致几率约化的复杂化. 由ψ函数表征的态不能分解为几率是相加性的子系. 而在经典力学中, 测量表明几率分解为代表子系的各部分, 在量子力学中,每一测量给出一新态,而不是对子态的选择.

在量子力学中,我们能区别两种情况:

纯粹情形(图 6.1): 几率是诸ψ函数的二次型. 例如, 在光阑的两个孔肯定开着的情况中,就是这样. 这时,粒子到底通过光阑上哪个孔是不确定的.

纯粹情形

$$\psi(x)=c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x)$$
$$\varphi(p)=c_1\varphi(p)+c_2\varphi_2(p)$$
$$|c_1|^2+|c_2|^2=1$$

图 6.1

混合情形

$$\widetilde{W}(x)=g_1|\psi_1(x)|^2+g_2|\psi_2(x)|^2$$
$$W(p)=g_1|\varphi_1(p)|^2+g_2|\varphi_2(p)|^2$$
$$0<g<1$$

图 6.2

现在我们安装一个光闸, 它总是遮住两孔之一,但我们假定,我们并不了解,在任一给定时刻到底哪个孔被遮盖. 在此情况中,我们说, 我们不知道粒子通过了哪一个孔. 这种情况我们称之为混合情形.

混合情形(图 6.2): 几率是加性的; 态不能用ψ函数来描述. 所以分解为子系是可能的, 直至由每一子系所代表的态是纯粹情形为止;即,在混合情形, 几率为纯粹情形几率之和. 若我们对所

有的位相求平均，或用某种方法破坏位相间的关系，则总是得到混合情形。

当然，区别经典力学中的纯粹情形和混合情形在原则上也是可能的，只不过在 p 和 x 精确地已知的意义上，这种纯粹情形是无关重要的。

第二章　在势箱中和自由空间中粒子的描述

§7. 势箱中的单个粒子. 连续性方程

首先,我们只限于考察一维情况(图 7.1).



图 7.1

通过求解波动方程

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2},\qquad [7.1]$$

并用边界条件

$$\psi(0,t)=\psi(L,t)\equiv 0,\qquad [7.2]$$

我们来求对应的波函数.

首先, 用驻波作为出发点,

$$\psi(x,t)=u(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right],\ E=\frac{p^2}{2m},\qquad [7.3]$$

我们来确定定态的解. 于是,几率

$$W(x)=|\psi(x,t)|^2=|u(x)|^2$$

与时间无关. 方程式

$$E\cdot u=-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}\ \text{或}\ u(x)+\frac{\hbar^2}{p^2}u''(x)=0$$

的最普遍解为

$$u(x)=A\exp\left[i\frac{px}{\hbar}\right]+B\exp\left[-i\frac{px}{\hbar}\right].$$

边界条件的满足:

$$\psi(0,t)\equiv 0;\quad B=-A \text{ 或} u=C\sin\frac{px}{\hbar};$$

$$\psi(L,t)\equiv 0;\quad \frac{|p|L}{\hbar}=n\pi, \text{或} u_n=C\sin\left(\pi\frac{x}{L}n\right),$$

$$n=0,1,2,\cdots.$$

归一化:

$$\int_0^L|u_n|^2\mathrm{d}x=|C|^2\cdot\frac{1}{2}L=1,\ |C|=\sqrt{\frac{2}{L}},$$

$$\psi_n(x,t)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\pi\frac{x}{L}n\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_nt\right],$$

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}. \tag{7.4}$$

位形空间中的几率密度:

$$W(x)=\frac{2}{L}\sin^2\left(\pi\frac{x}{L}n\right). \tag{7.5}$$

动量空间中的几率密度: 量$|p_x|=n\pi\hbar/L$已给定;

所以

$$W(p_n)=W(-p_n)=\frac{1}{2}. \tag{7.6}$$

依此, 人们不能论及处于定态的粒子的运动. 只当存在定态的一个线性叠加(波包)时运动才是可能的:

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_n c_n\sin\left(\pi\frac{x}{L}n\right)\exp\left[-\frac{i\hbar\pi^2}{2mL^2}n^2t\right]. \tag{7.7}$$

不难验证, 正交性关系

$$\int_0^L u_n^*(x)u_m(x)\mathrm{d}x=\delta_{nm} \tag{7.8}$$

成立.

在三维区域中，我们有类似的本征值问题(图 7.2)：

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi,\ \text{在}\ S\ \text{上}\ \psi=0\\&\psi=\sum_n c_n\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n t\right]u_n(\boldsymbol{x})\\&\nabla^2 u_n+\lambda_n u_n=0,\ \lambda_n=\frac{2mE_n}{\hbar^2}\end{aligned}\right\}.\quad[7.9]$$



图 7.2

现在我们想来证明，在电动力学中已知形式的连续性方程①是由波动方程导出的. 在这里几率流密度代替了电流密度②

$$\boldsymbol{i}=\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\mathrm{grad}\psi-\psi\mathrm{grad}\psi^*),\qquad[7.10]$$

而连续性方程为

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}\int_V\psi^*\psi\mathrm{d}V+\int_S\boldsymbol{i}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=0\\&\text{或}\\&\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+\mathrm{div}\boldsymbol{i}=0\end{aligned}\right\}.\qquad[7.11]$$

我们若以 ψ^* 乘 ψ 的方程[7.9]，而以 ψ 乘 ψ^* 的方程，则它们的和为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)=0.$$

连续性方程是从这一方程并借助于下列的格林和高斯公式而导出的：

$$\mathrm{div}(a\,\mathrm{grad}b)=\mathrm{grad}a\cdot\mathrm{grad}b+a\nabla^2 b.$$

---

① 当然，这里的连续性方程是更普遍地有效的. 它包含了作为特殊情况的电动力学的连续性方程.

② 由于我们只能指明在给定体积元中发现粒子的几率，所以这一几率的"流"代替了粒子流.

在我们的边界值问题中，在 S 上 $i=0$；所以，得出

$$\int_V \psi^* \psi \mathrm{d}V = 常数.$$

对于本征函数，我们有正交性关系

$$\int_V u_n^* u_m \mathrm{d}V = 0, \quad \lambda_n \neq \lambda_m. \qquad [7.12]$$

证明：若我们以 u_m^* 乘 u_n 的方程[7.9]，以 $-u_n$ 乘 u_m^* 的方程，则其和为

$$(u_m^* \nabla^2 u_n - u_n \nabla^2 u_m^*) + (\lambda_n - \lambda_m^*) u_m^* u_n = 0.$$

再利用格林公式，并应用边界条件，我们得到

$$(\lambda_n - \lambda_m^*) \int_V u_n^* u_m \mathrm{d}V = 0;$$

$n=m$：$\lambda_n = \lambda_n^*$ 或 λ_n 为实量，

$\lambda_n \neq \lambda_m$：$\int u_n^* u_m \mathrm{d}V = 0$，

$\lambda_n = \lambda_m$，$n \neq m$：这称之为态 n 和态 m 的简并性．简并度定义为属于本征值 λ_n 的独立解的数目．这些解不必是正交的．然而，通过适当地选取本征函数的基，能使它们成为正交的．

§8. 连续谱的归一化．狄拉克 δ-函数

若不存在壁或力场，则不再对波函数有限制；即，p 连续地变化．我们能用傅里叶积分来表示 $\psi(x, t)$（参见[4.1]和[3.15]式，以及 $p=\hbar k$）：

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p, t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} p x\right] \mathrm{d}p$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t + \frac{i}{\hbar} p x\right] \mathrm{d}p. \qquad [8.1]$$

若将此式与本征态的线性叠加（参见[7.7]式）

$$\psi(x,t)=\sum_n c_n u_n(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{p_n^2}{2m}t\right]$$

加以对比，则类似于$u_n(x)$引入函数$u(p,x)$是一个简单的推广；在此情况中，我们有

$$\left.\begin{aligned}\psi(x,t)&=\int\varphi(p)u(p,x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t\right]\mathrm{d}p\\&=\int\varphi(p,t)u(p,x)\mathrm{d}p\\u(p,x)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}px\right]\end{aligned}\right\}. \qquad [8.2]$$

我们形式地将正交性关系写为

$$\int u^*(p,x)\cdot u(p',x)\mathrm{d}x=\delta(p-p'). \qquad [8.3]$$

这是一个便利的符号表示法；符号$\delta(p-p')$（狄拉克δ-函数）具有如下的意义：

$$\int_{p_1}^{p_2}f(p)\delta(p-p')\mathrm{d}p=\begin{cases}f(p'),\text{若 }p'\text{ 在区间}(p_1,p_2)\text{之内；}\\0,\text{若 }p'\text{ 在区间}(p_1,p_2)\text{之外.}\end{cases} \qquad [8.4]$$

在正常的意义上"函数"$\delta(x)$并不存在[A-2]，因为它必须具有如下的性质

$$\delta(x)=\begin{cases}0, & x\neq 0,\\\infty, & x=0.\end{cases}$$

宁可说，它是以如下方式实行的极限过程的符号．我们考察那样一个函数$\delta_n(x)$，它使得①

$$\int\delta_n(x)\mathrm{d}x=1,\quad \lim_{n\to\infty}\delta_n(x)=\begin{cases}0, & x\neq 0,\\\infty, & x=0.\end{cases}$$

---

① 英译本有误，漏印第二个式子．——中译者注

例如:

1. $\delta_n(x)=n\exp[-\pi n^2x^2]$

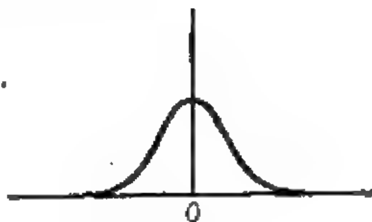


图 8.1

2. $\delta_n(x)=\frac{\sin nx}{\pi x}$

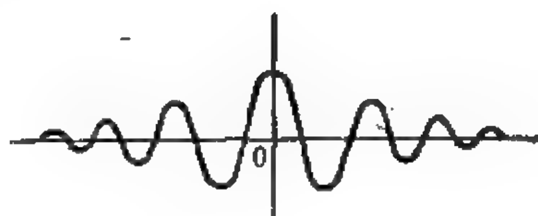


图 8.2①

3. $\delta_n(x)=\begin{cases}0, & |x|>1/2n,\\ n, & |x|<1/2n.\end{cases}$

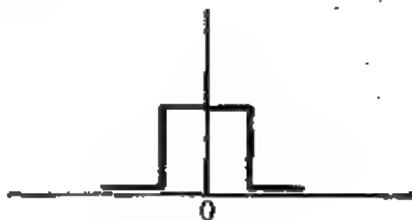


图 8.3

因此，我们有

$$\lim_{n\to\infty}\int_{p_1}^{p_2}f(p)\delta_n(p-p')\mathrm{d}p$$

$$=\begin{cases}f(p'), & \text{若 } p' \text{ 在区间}(p_1, p_2)\text{之内},\\ 0, & \text{若 } p' \text{ 在区间}(p_1, p_2)\text{之外}.\end{cases}$$

我们也可以说，$\delta(x)$能够利用常义函数$\delta_n(x)$逼近；例如，我们可

① 英译本增图(德文原本无此图)。——中译者注

以让矩形无限地变高变窄，而保持其面积不变．或更普遍些

$$\delta_n(x)=\frac{1}{2\pi}\int A_n(p)\exp[ipx]\mathrm{d}p \quad 以及 \int\delta_n(x)\mathrm{d}x=1;$$

于是

$$A_n(p)=\int\delta_n(x)\exp[-ipx]\mathrm{d}x,\ A_n(0)=1,\ \lim_{n\to\infty}A_n(p)=1,$$

因此，

$$\delta(x)\sim\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp[ipx]\mathrm{d}p.$$

这意味着，代替严格的傅里叶公式

$$f(0)=\frac{1}{2\pi}\int\mathrm{d}p\int f(x)\exp[ipx]\mathrm{d}x,$$

人们用符号的形式写成

$$f(0)=\int f(x)\delta(x)\mathrm{d}x.$$

将 δ-函数推广到三维是简单的：

$$\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=\delta(x_1-x_1')\cdot\delta(x_2-x_2')\cdot\delta(x_3-x_3').$$

[8.3]式对 p 的积分给出

$$\int\mathrm{d}x\int_{p_1}^{p_2}u^*(p,x)\mathrm{d}p\cdot u(p',x)=\begin{cases}1, & p'\ 在间隔(p_1,p_2)之内,\\ 0, & p'\ 在间隔(p_1,p_2)之外.\end{cases}\qquad [8.5]$$

这一表达式与[8.3]和[8.4]式具有相同的意义．

现在，我们也能论证[8.3]式的正确性：因为[8.2]式给出的 $u(p,x)$ 满足[8.5]式，因而同样地满足正交性关系．即，利用

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int_{p_1}^{p_2}\exp\left[-\frac{i}{h}px\right]\mathrm{d}p=-\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\frac{h}{ix}\left(\exp\left[-\frac{i}{h}p_1x\right]-\exp\left[-\frac{i}{h}p_2x\right]\right),$$

并且因为

$$\frac{1}{\pi}\int\frac{\sin ax}{x}\mathrm{d}x=\begin{cases}+1, & a>0;\\-1, & a<0,\end{cases}$$

$$\frac{1}{\pi}\int\frac{\cos ax-\cos bx}{x}\mathrm{d}x=0,$$

则从[8.2]和[8.5]式得出

$$\frac{1}{2\pi}\int\mathrm{d}x\,\frac{\exp[(i/\hbar)(p'-p_1)x]-\exp[(i/\hbar)(p'-p_2)x]}{ix}$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int\frac{\sin\{(1/\hbar)(p'-p_1)x\}-\sin\{(1/\hbar)(p'-p_2)x\}}{x}\mathrm{d}x$$

$$=\begin{cases}1, & p'\text{ 在间隔}(p_1,p_2)\text{之内},\\0, & p'\text{ 在间隔}(p_1,p_2)\text{之外}.\end{cases}$$

§9. 完全性关系. 展开定理

令 $f(x)$ 是这样一个函数, 即 $\int|f(x)|^2\mathrm{d}x$ 存在. 若我们有函数 $\{u_n(x)\}$ 的一个正交归一化的全集, 即

$$\int u_n^*(x)u_m(x)\mathrm{d}x=\delta_{nm}, \qquad [9.1]$$

则我们能作级数展开

$$f(x)=\sum_n a_n u_n(x), \qquad [9.2]$$

式中

$$a_n=\int f(x)u_n^*(x)\mathrm{d}x. \qquad [9.3]$$

我们要求级数[9.2]均值收敛. 这是一个削弱了的收敛要求, 因为会对可能的"尖峰"积分:

$$\lim_{N\to\infty}\int|f(x)-\sum_{n=1}^{N}a_n u_n(x)|^2\mathrm{d}x=0, \qquad [9.4]$$

或

$$\lim_{N\to\infty}\int |R_N(x)|^2 dx = 0. \qquad [9.5]$$

由于[9.1]和[9.3]式，我们有

$$\begin{aligned}
&\int dx |f(x) - \sum_{n=1}^{N} a_n u_n(x)|^2 \\
&= \int dx |f(x)|^2 - \sum_{n=1}^{N} a_n \int f^*(x) u_n(x) dx - \sum_{n=1}^{N} a_n^* \int f(x) u_n^*(x) dx \\
&\quad + \sum_{n=1}^{N} a_n^* a_n \\
&= \int |f|^2 dx - \sum_{n=1}^{N} a_n^* a_n \qquad [9.6]
\end{aligned}$$

因为[9.6]式左端肯定不是负的，故得贝塞耳不等式：

$$\sum_{n=1}^{N} a_n^* a_n \leqslant \int |f|^2 dx, \quad 或 \quad \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 \leqslant \int |f|^2 dx. \qquad [9.7]$$

贝塞耳不等式意味着[9.4]式与下式意义相同

$$\sum_{n=1}^{N} |a_n|^2 = \int |f|^2 dx. \qquad [9.8]$$

这一方程称为完全性关系，因为它保证了u_n中没有被遗漏者，即u_n的集是完全的①.

利用代换

$$f(x) \longrightarrow c_1 f(x) + c_2 g(x),$$

$$a_n \longrightarrow c_1 a_n + c_2 b_n, \quad b_n = \int g(x) u_n^*(x) dx,$$

可以简单地推广到两个或两个以上的函数. 例如，代入[9.8]式，

① 因为我们在此处理无限多个函数的集合，所以我们不能，例如通过计数，来建立完全性.

并比较$c_1^*c_2$的系数，则得

$$\sum_{n=1}^{\infty}a_n^*b_n=\int f^*(x)g(x)\mathrm{d}x. \tag{9.9}$$

利用 δ-函数，也能将完全性关系用符号的形式写为

$$\sum_n u_n^*(x)u_n(x')=\delta(x-x'). \tag{9.10}$$

这能以如下方式得到证实．我们若将上式乘以 $f^*(x')$，并对它积分，则利用[9.3]式，我们得到

$$\sum_n u_n^*(x)\int u_n(x')f^*(x')\mathrm{d}x'=f^*(x). \tag{9.11}$$

以 $g(x)$ 乘这个式子，并再次积分，得

$$\sum_n\int g(x)u_n^*(x)\mathrm{d}x\int u_n(x')f^*(x')\mathrm{d}x'$$

$$=\int f^*(x)g(x)\mathrm{d}x, \tag{9.12}$$

这正是[9.9]式．

注意：事实上，在物理学中所出现的所有实际情况中，[9.11]式都是正确的．然而，由于我们只曾要求级数是均值收敛的，为了严谨起见，我们必须再次积分．即，我们必须变换成[9.12]式．

§10. 初值问题和基本解

若在时刻 $t=0$ 粒子必定处于位置 x'，即

$$\psi(x,0)=\delta(x-x'), \tag{10.1}$$

则描述这样一个粒子的波动方程的解，我们称之为基本解 $K(x,x',t)$．

我们首先考察势箱中的粒子．这一情况的通解为(参见§7)

$$\psi(x,t)=\sum_n c_nu_n(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_nt\right]. \tag{10.2}$$

利用完全性关系[9.10],我们也能即刻写出基本解

$$\psi(x,t)\equiv K(x,x',t)=\sum_n u_n(x)u_n^*(x')\exp\left[-\frac{i}{h}E_nt\right], \tag{10.3}$$

或者,对于具有任意边界的三维区域,有

$$K(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}',t)=\sum_n u_n(\boldsymbol{x})u_n^*(\boldsymbol{x}')\exp\left[-\frac{i}{h}E_nt\right]. \tag{10.4}$$

鉴于只有定态的线性叠加才能作为势箱中的一个粒子的波函数(必须在所有时刻都一定满足边界条件),对自由空间中的粒子则无这样的限制. 在后一情况中,我们有连续的变量 p,而不是分立的指标 n (参见 §8),而波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\int\varphi(p)u(p,x)\exp\left[-\frac{i}{h}\frac{p^2}{2m}t\right]dp\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int\varphi(p)\exp\left[\frac{i}{h}\left(px-\frac{p^2}{2m}t\right)\right]dp\end{aligned} \tag{10.5}$$

其归一化为

$$\int u^*(p,x)u(p',x)dx=\delta(p-p'). \tag{10.6}$$

完全性关系[9.10]现在写成如下形式

$$\int u(p,x)u^*(p,x')dp=\delta(x-x') \tag{10.7}$$

(注意 x 与 p 间的对称性!),它又使我们能立即写出基本解:

$$\psi(x,t)=\int u(p,x)u^*(p,x')\exp\left[-\frac{i}{h}\frac{p^2}{2m}t\right]dp, \tag{10.8}$$

或,与[10.5]式比较,得

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&\equiv K(x-x',t)\\&=\frac{1}{2\pi h}\int\exp\left\{\frac{i}{h}\left[p(x-x')-\frac{p^2}{2m}t\right]\right\}dp.\end{aligned} \tag{10.9}$$

我们能计算这个积分:

$$K(x-x',t)=\frac{1}{2\pi h}\exp\left[\frac{i}{h}\cdot\frac{m}{2}\cdot\frac{(x-x')^2}{t}\right]\cdot\int\exp\left[-\frac{i}{h}\left(p-\frac{(x-x')m}{t}\right)^2\cdot\frac{t}{2m}\right]dp.$$

作代换

$$p-\frac{(x-x')m}{t}=\sqrt{\frac{2mh}{t}}\cdot u$$

导致菲涅耳积分:

$$\int\exp[iu^2]du=\sqrt{\pi}\cdot\exp\left[i\frac{\pi}{4}\right],$$

$$\int\exp[-iu^2]du=\sqrt{\pi}\cdot\exp\left[-i\frac{\pi}{4}\right]=\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{i}}. \qquad [10.10]$$

现在可将解$K(x-x',t)$写为

$$K(x-x',t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi hi}}\cdot\sqrt{\frac{m}{t}}\cdot\exp\left[\frac{i}{h}\cdot\frac{m(x-x')^2}{2t}\right]. \qquad [10.11]$$

利用[10.10]式, 也即刻得出

$$\int K(x-x',t)dx=1. \qquad [10.12]$$

现在, 我们想不用狄拉克函数而来证明: 由[10.11]式定义的$K(x-x',t)$具有基本解的性质. 令$\xi\equiv x-x'$. 我们来计算

$$\lim_{t\to0}\int_{t_1}^{t_2}K(\xi,t)d\xi.$$

作代换

$$\sqrt{\frac{m}{2ht}}\cdot\xi=u,$$

我们得到

$$\int_{t_1}^{t_2}K(\xi,t)d\xi=\frac{\exp[-i(\pi/4)]}{\sqrt{2\pi h}}\sqrt{\frac{m}{t}}.$$

$$\cdot\sqrt{\frac{2ht}{m}}\int_{u_1}^{u_2}\exp[iu^2]\mathrm{d}u.$$

应该考虑三种情况:

$$\left.\begin{array}{ll} a.\ \xi_1>0,\xi_2>0:\ u_1>0, & u_2>0 \\ \qquad t\to 0:\ u_1\to+\infty, u_2\to+\infty \\ b.\ \xi_1<0,\xi_2<0:\ u_1<0, & u_2<0 \\ \qquad t\to 0:\ u_1\to-\infty, u_2\to-\infty \end{array}\right\}\lim_{t\to 0}\int_{\xi_1}^{\xi_2}K\mathrm{d}\xi=0,$$

$$\left.\begin{array}{ll} c.\ \xi_1<0,\xi_2>0:\ u_1<0, & u_2>0 \\ \qquad t\to 0:\ u_1\to-\infty, u_2\to+\infty \end{array}\right\}\lim_{t\to 0}\int_{\xi_1}^{\xi_2}K\mathrm{d}\xi=1.$$

在计算情况 c 时已用到公式[10.10]. a, b 和 c 三种情况合在一起对应于

$$K(\xi,0)=\delta(\xi),$$

还有待证明, $K(\xi,t)$满足波动方程

$$\frac{\partial K}{\partial t}=\frac{ih}{2m}\cdot\frac{\partial^2K}{\partial\xi^2}:$$

$$\frac{\partial K}{\partial t}=\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2\pi hi}}\left(-\frac{1}{2}\frac{1}{t\sqrt{t}}-\frac{1}{\sqrt{t}}\cdot\frac{i}{h}\cdot\frac{m\xi^2}{2t^2}\right)\exp\left[\frac{i}{h}\frac{m\xi^2}{2t}\right],$$

$$\frac{\partial K}{\partial\xi}=\sqrt{\frac{m}{2\pi hi}}\cdot\frac{1}{\sqrt{t}}\cdot\frac{im}{ht}\cdot\xi\cdot\exp\left[\frac{i}{h}\frac{m\xi^2}{2t}\right],$$

$$\frac{\partial^2K}{\partial\xi^2}=\sqrt{\frac{m}{2\pi hi}}\cdot\frac{1}{\sqrt{t}}\left(\frac{im}{ht}-\frac{m^2}{h^2t^2}\xi^2\right)\exp\left[\frac{i}{h}\frac{m\xi^2}{2t}\right]$$

$$=\frac{2m}{ih}\cdot\frac{\partial K}{\partial t}.$$

证完.

值得注意的是, 从热传导理论中基本解[10.11]已为人们所熟知. 若我们用一个纯虚量来代替非相对论性波动方程中的质量m, 则我们确实得到热传导方程, 而高斯分布[10.11]是 $t=0$ 时刻由 δ-函数描述的热脉冲的熟知的解.

第三章　力场中的粒子

§11. 哈密顿算符

利用哈密顿函数

$$H=\sum_{k=1}^{3}\frac{p_k^2}{2m}+V(x_1, x_2, x_3, t), \qquad [11.1]$$

可将经典力学的运动方程写成正则形式

$$\left.\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}p_k}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\partial H}{\partial x_k}=-\frac{\partial V}{\partial x_k}\\ \frac{\mathrm{d}x_k}{\mathrm{d}t}&=+\frac{\partial H}{\partial p_k}=\frac{p_k}{m}\end{aligned}\right\}. \qquad [11.2]$$

引入矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{H}=\nabla\times\boldsymbol{A})$，我们得到在磁场$\boldsymbol{H}$ 中具有电荷 e 的粒子所对应的方程:

$$H=\sum_{k=1}^{3}\frac{1}{2m}\left\{p_k-\frac{e}{c}A_k(x)\right\}^2+V(x_1, x_2, x_3), \qquad [11.3]$$

$$\left.\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}p_k}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\partial H}{\partial x_k}=-\frac{\partial V}{\partial x_k}+\frac{1}{m}\sum_i\left(p_i-\frac{e}{c}A_i\right)\cdot\frac{e}{c}\frac{\partial A_i}{\partial x_k}\\ \frac{\mathrm{d}x_k}{\mathrm{d}t}&=+\frac{\partial H}{\partial p_k}=\frac{1}{m}\left(p_k-\frac{e}{c}A_k\right)\end{aligned}\right\}. \qquad [11.4]$$

我们再次应用[2.2]式给出的，作为经典力学和波动力学间的转换关键的算符形式体系:

$$p_k\rightarrow -ih\frac{\partial}{\partial x_k}, E\rightarrow ih\frac{\partial}{\partial t}. \qquad [11.5]$$

由于引入了算符，哈密顿函数变成所谓哈密顿算符:

$$H(p_i, x_i) \to \underline{H}\left(\frac{\partial}{\partial x_i}, x_i\right). \qquad [11.6]$$

一般地，将一算符$\underline{A}$理解为一个计算规则①，它把一函数u和另一函数$\underline{A}u$联系起来.

在不受力作用的情况($V\equiv 0$)中，我们也能用算符［11.5］和［11.6］写出波动方程［2.11］：

$$\underline{H}\psi = \underline{E}\psi. \qquad [11.7]$$

对于力场中的粒子($V\neq 0$)，这一方程也给出正确的结果. 于是，将这一方程全部写出，即为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}; \qquad [11.8]$$

这一形式首先是由薛定谔提出的②.

恰巧方程［11.7］在更复杂的情况下也是正确的，例如，在磁场中的带电粒子的情况. 然而，当以哈密顿算符代替经典哈密顿函数时，有时会引起含混. 这是由于乘积中因数的次序对经典量来讲是无关紧要的，

$$p_i x_k = x_k p_i,$$

而对于算符来说，次序却是非常重要的. 例如，后面我们将会求得

$$\underline{p_i}\,\underline{x_k} - \underline{x_k}\,\underline{p_i} = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik}.$$

因此，从一个给定的哈密顿函数也许能导出几个不同的算符③. 这些不同的可能性中的哪一个是正确的，只能由实验来判断；即，由方程［11.7］的解所求得的期待值必须遵循经典轨道.

---

① 这种计算规则不一定是微分运算. 例如，算符$\underline{x}$定义为用x相乘.

② E. Schrödinger, *Ann. Physik* 81, 109(1926).

③ 例如，在非笛卡儿坐标中出现象$p_i x_k$这种引起含混的交叉项.

§12. 厄密算符

波动方程[11.7]的解必须满足归一化守恒的重要条件:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \psi^*\psi \mathrm{d}^3x=0. \qquad [12.1]$$

(想到 $\psi^*\psi$ 诠释为几率密度，便不难从物理意义上理解这个条件.)

对[12.1]式求导, 并利用下二方程

$$-\frac{h}{i}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial t}=\underline{H}\psi \text{ 和 } +\frac{h}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=(\underline{H}\psi)^*, \qquad [12.2]$$

则得

$$\int[\psi^*(\underline{H}\psi)-\psi(\underline{H}\psi)^*]\mathrm{d}^3x=0. \qquad [12.3]$$

这是关于$\underline{H}$的一个条件. 任何满足这一关系的算符称为**厄密的**.

因为, 对于波, 叠加原理应该成立, 所以我们必须要求

$$\left.\begin{aligned}\underline{H}(c\psi)&=c\underline{H}\psi\\ \underline{H}(\psi_1+\psi_2)&=\underline{H}\psi_1+\underline{H}\psi_2\end{aligned}\right\}. \qquad [12.4]$$

具有这种性质的算符称为**线性的**.

若将

$$\psi=\psi_1+\psi_2$$

代入[12.3]式, 则对于一个线性厄密算符$\underline{H}$我们得到

$$\int[\psi_1^*(\underline{H}\psi_2)-\psi_2(\underline{H}\psi_1)^*]\mathrm{d}^3x=0. \qquad [12.5]$$

若$\underline{F}$和$\underline{G}$为线性厄密算符, 而 a 和 b 为实数, 则我们有

$$a\underline{F}+b\underline{G} \quad \text{厄密的}, \qquad [12.6]$$

$$\underline{F}\underline{G}+\underline{G}\underline{F} \quad \text{厄密的}, \qquad [12.7]$$

$$i(\underline{F}\underline{G}-\underline{G}\underline{F}) \quad \text{厄密的}, \qquad [12.8]$$

但$\underline{F}\underline{G}$一般不是厄密的.

[12.7]式的证明：由[12.5]式我们有

$$\int\{(\underline{H}_1\psi_1)^*\underline{H}_2\psi_2-\psi_2(\underline{H}_2\underline{H}_1\psi_1)^*\}\mathrm{d}^3x=0, \qquad [a]$$

$$\int\{(\underline{H}_2\psi_2)^*\underline{H}_1\psi_1-\psi_1(\underline{H}_1\underline{H}_2\psi_2)^*\}\mathrm{d}^3x=0,$$

$$\int\{\underline{H}_2\psi_2(\underline{H}_1\psi_1)^*-\psi_1^*\underline{H}_1\underline{H}_2\psi_2\}\mathrm{d}^3x=0 \qquad [b]$$

[a]—[b]:

$$\int\{\psi_1^*\underline{H}_1\underline{H}_2\psi_2-\psi_2(\underline{H}_2\underline{H}_1\psi_1)^*\}\mathrm{d}^3x=0. \qquad [c]$$

将$\underline{H}_1=\underline{F}$, $\underline{H}_2=\underline{G}$代入[c]式；再将$\underline{H}_1=\underline{G}$, $\underline{H}_2=F_2$代入[c]式，然后相加：

$$\int\{\psi_1^*(\underline{F}\underline{G}+\underline{G}\underline{F})\psi_2-\psi_2[(\underline{G}\underline{F}+\underline{F}\underline{G})\psi_1]^*\}\mathrm{d}^3x=0.$$

证完.

厄密算符的例子：算符

$$\underline{p}=-i\hbar(\partial/\partial x)$$

是厄密的，这可通过分部积分看出：

$$\int\psi^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}\mathrm{d}x=-\frac{\hbar}{i}\int\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\mathrm{d}x=\int\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^*\psi\mathrm{d}x.$$

另一方面，$i\underline{p}$不是厄密的. 算符$\underline{p}^2=-\hbar^2(\partial^2/\partial x^2)$也是厄密的，因为

$$\int\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi\right)\mathrm{d}x=0 \quad (\text{格林公式}).$$

任何规定为以x的实函数相乘的算符显然是厄密的. 因此，势$\underline{V}(x)$是厄密的，这意味着我们的哈密顿算符

$$\underline{H}\psi=\left(\frac{\underline{p}^2}{2m}+\underline{V}(x)\right)\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(x)\psi, \qquad [12.9]$$

也是厄密的.

甚至在磁场的情况中$\underline{H}$仍然是厄密的. 当我们写出对应于[11.3]式的哈密顿算符时，我们只须注意各因子的次序：不能写成

$$\left(p_k-\frac{e}{c}A_k\right)^2=p_k^2-2\frac{e}{c}p_kA_k+\frac{e^2}{c^2}A_k^2,$$

而必须写成

$$\left(p_k-\frac{e}{c}A_k\right)^2=p_k^2-\frac{e}{c}p_kA_k-\frac{e}{c}A_kp_k+\frac{e^2}{c^2}A_k^2.$$

为了证明以这种方式从[11.3]式导出的哈密顿算符的厄密性，我们只需证明：

$$\underline{p_k}\underline{A_k}+\underline{A_k}\underline{p_k}$$

是厄密的(公式[12.7]的特殊情况). 这一结果是用分部积分得到的：

$$\begin{aligned}&\int\psi^*\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}(A_k\psi)+A_k\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x_k}\right\}d^3x\\&=-\int\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial x_k}(A_k\psi)+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}(\psi^*A_k)\psi\right\}d^3x\\&=\int\psi\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x_k}A_k+\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}(\psi A_k)\right\}^*d^3x.\end{aligned}$$

§ 13. 期待值和经典运动方程. 对易关系(对易子)

迄今我们已学会用波函数来计算可观察量的几率分布. 若经典力学应该作为极限情况包含在波动力学中，则这些量的期待值必须遵从经典运动方程. 现在我们来验证确实如此.

首先我们来计算$\langle\underline{x_k}\rangle$的时间导数(参见[3.5]以及[12.2]和[12.5]式)：

$$\langle\underline{x_k}\rangle=\int\psi^*\underline{x_k}\psi d^3x;$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\underline{x}_k\rangle=\frac{i}{h}\int[(\underline{H}\,\psi)^*x_k\psi-\psi^*\underline{x}_k(\underline{H}\,\psi)]\mathrm{d}^3x$$

$$=\frac{i}{h}\int[\psi^*(\underline{H}\,\underline{x}_k\psi)-\psi^*\,\underline{x}_k\underline{H}\,\psi]\mathrm{d}^3x$$

$$=\frac{i}{h}\int\psi^*(\underline{H}\,\underline{x}_k-\underline{x}_k\underline{H})\,\psi\,\mathrm{d}^3x,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\underline{x}_k\rangle=\frac{i}{h}\langle\underline{H}\,\underline{x}_k-\underline{x}_k\underline{H}\rangle. \qquad [13.1]$$

同理，我们能导出

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\underline{p}_k\rangle=\frac{i}{h}\langle\underline{H}\,\underline{p}_k-\underline{p}_k\underline{H}\rangle. \qquad [13.2]$$

现在,我们必须计算[13.1]和[13.2]两式等式右端之值．一般地，形式如

$$\underline{F}_1\underline{F}_2-\underline{F}_2\underline{F}_1\equiv[\underline{F}_1,\,\underline{F}_2] \qquad [13.3]$$

的表达式称为对易子．由定义[13.3]式立即得到如下的关系

$$[\underline{F}_1\underline{F}_2,\,\underline{F}_3]\equiv\underline{F}_1[\underline{F}_2,\,\underline{F}_3]+[\underline{F}_1,\,\underline{F}_3]\underline{F}_2 \qquad [13.4]$$

和

$$[c_1\underline{F}_1+c_2\underline{F}_2,\,\underline{F}_3]\equiv c_1[\underline{F}_1,\,\underline{F}_3]+c_2[\underline{F}_2,\,\underline{F}_3]. \qquad [13.5]$$

为了与傅里叶变换公式[4.3]和[4.4]一致，现在我们定义与[12.9]式类似的,关于动量和坐标的算符:

$$\underline{p}_k\psi(x)=\frac{h}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x_k}\psi, \qquad \underline{x}_k\psi(x)=x_k\psi, \qquad [13.6]$$

$$\underline{p}_k\varphi(p)=p_k\varphi, \qquad \underline{x}_k\varphi(p)=-\frac{h}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial p_k}\varphi. \qquad [13.7]$$

根据这些定义,我们可立即导出基本对易关系:

$$\left.\begin{aligned}&\underline{p}_k\underline{x}_l-\underline{x}_l\underline{p}_k=\delta_{lk}\cdot\frac{h}{i}\\&\underline{p}_k\underline{p}_l-\underline{p}_l\underline{p}_k=0\\&\underline{x}_k\underline{x}_l-\underline{x}_l\underline{x}_k=0\end{aligned}\right\}. \qquad [13.8]$$

例如:

$$\underline{p}_k \underline{x}_l \psi = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}(x_l \psi),\ \underline{x}_l \underline{p}_k \psi = x_l \frac{h}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x_k}\psi;$$

$$(\underline{p}_k \underline{x}_l - \underline{x}_l \underline{p}_k)\psi = \frac{h}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x_k}(x_l \psi) - x_l \frac{\partial}{\partial x_k}\psi\right) = \delta_{kl}\frac{h}{i}\psi,$$

等等①.

利用[13.4]和[13.8]式,我们得到

$$\sum_i(\underline{p}_i^2 \underline{x}_k - \underline{x}_k \underline{p}_i^2) = \sum_i\{\underline{p}_i(\underline{p}_i \underline{x}_k - \underline{x}_k \underline{p}_i) + (\underline{p}_i \underline{x}_k - \underline{x}_k \underline{p}_i)\underline{p}_i\}$$

$$= 2\frac{h}{i}\underline{p}_k = \frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial \underline{p}_k}\sum_i \underline{p}_i^2.$$

这里我们引入了关于算符的函数对算符的微分的新运算. 我们定义:这一微分法必须完全以通常的方式,即函数相对于寻常的变量作微分.

对于由 $\underline{p}_k$ 的多项式, 或在极限情况下由 $\underline{p}_k$ 的收敛幂级数(即,$\underline{p}_k$ 的解析函数)给出的算符 $\underline{F}$,重复应用这种运算步骤, 我们得到

$$\underline{F}(\underline{p})\underline{x}_k - \underline{x}_k \underline{F}(\underline{p}) = \frac{h}{i}\frac{\partial \underline{F}}{\partial \underline{p}_k}. \quad [13.9]$$

当然,关系式

$$\underline{F}(\underline{p})\underline{p}_k - \underline{p}_k \underline{F}(\underline{p}) = 0 \quad [13.10]$$

也成立. 以类似的方法,利用[4.3]和[4.4]式,我们得到

$$\underline{G}(\underline{x})\underline{p}_k - \underline{p}_k \underline{G}(\underline{x}) = -\frac{h}{i}\frac{\partial G}{\partial x_k}, \quad [13.11]$$

$$\underline{G}(\underline{x})\underline{x}_k - \underline{x}_k \underline{G}(\underline{x}) = 0. \quad [13.12]$$

对最后的四个关系式求和,给出

---

① "等等"两字系按德文原本补入.——中译者注

$$\underline{H}\underline{p}_k-\underline{p}_k\underline{H}=-\frac{h}{i}\cdot\frac{\partial \underline{H}}{\partial \underline{x}_k}, \qquad [13.13]$$

$$\underline{H}\underline{x}_k-\underline{x}_k\underline{H}=\frac{h}{i}\cdot\frac{\partial \underline{H}}{\partial \underline{p}_k}, \qquad [13.14]$$

式中$\underline{H}$为如下形式的算符

$$\underline{H}(\underline{p},\underline{x})=\underline{F}(\underline{p})+\underline{G}(\underline{x}). \qquad [13.15]$$

因此，这一结果适用于具有势的哈密顿算符．易证，[13.13]和[13.14]两式对于下列算符也成立：

$$\underline{H}(\underline{p},\underline{x})=\underline{F}(\underline{p})+\underline{G}(\underline{x})+\sum_k\{\underline{A}_k(\underline{x})\underline{p}_k+\underline{p}_k\underline{A}_k(\underline{x})\} \qquad [13.16]$$

（具有磁场的哈密顿算符）．若将[13.13]和[13.14]两式代人[13.1]和[13.2]两式，则得到关于x_k和p_k的平均值的经典正则运动方程：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\underline{x}_k\rangle=\left\langle\frac{\partial \underline{H}}{\partial \underline{p}_k}\right\rangle,\qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\underline{p}_k\rangle=-\left\langle\frac{\partial \underline{H}}{\partial \underline{x}_k}\right\rangle. \qquad [13.17]$$

（这并非纯属偶然；相反，理论是如此建立起来的，使得它总会得到[13.17]式．总应要求：合理的理论把经典力学作为极限情况包括在内．）

作为推广，我们着手考察算符$\underline{F}$显含时间的情况（例如，与时间有关的力）．由

$$\langle\underline{F}\rangle=\int\psi^*(\underline{F}\psi)\mathrm{d}^3x$$

和波动方程[12.2]得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\underline{F}\rangle=\frac{i}{h}\int\{(\underline{H}\psi)^*(\underline{F}\psi)-\psi^*\underline{F}(\underline{H}\psi)\}\mathrm{d}^3x+\int\psi^*\frac{\partial \underline{F}}{\partial t}\psi\mathrm{d}^3x$$

$$=\int\psi^*\left\{\frac{i}{h}(\underline{H}\underline{F}-\underline{F}\underline{H})+\frac{\partial \underline{F}}{\partial t}\right\}\psi\mathrm{d}^3x,\ (参见[12.5]式)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\underline{F}\rangle=\left\langle\frac{i}{h}[\underline{H},\underline{F}]+\frac{\partial \underline{F}}{\partial t}\right\rangle. \qquad [13.18]$$

对 $\underline{F}=\underline{H}$ 的情况，我们得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \underline{H}\rangle=\left\langle\frac{\partial \underline{H}}{\partial t}\right\rangle. \qquad [13.19]$$

若 $\partial \underline{H}/\partial t=0$，则得到 $\langle \underline{H}\rangle=$常数；这是能量守恒定律的表述.

作为一个例子，让我们专门讨论磁场的情况：

$$\begin{aligned}\underline{H}&=\frac{1}{2m}\sum_k\left(\underline{p}_k-\frac{e}{c}\underline{A}_k(x,t)\right)^2+\underline{V}(x,t)\\&=\frac{1}{2m}\sum_k\left(\underline{p}_k^2-\frac{e}{c}\ (\underline{p}_k\underline{A}_k+\underline{A}_k\underline{p}_k)+\frac{e^2}{c^2}\underline{A}_k^2\right)+\underline{V}.\end{aligned} \qquad [13.20]$$

应用[13.17]式，我们得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \underline{x}_k\rangle=\frac{1}{m}\langle \underline{p}_k-\frac{e}{c}\underline{A}_k\rangle, \qquad [13.21]$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \underline{p}_k\rangle&=\left\langle\frac{1}{2m}\frac{e}{c}\sum_i\left\{\left(\underline{p}_i\frac{\partial \underline{A}_i}{\partial \underline{x}_k}+\frac{\partial \underline{A}_i}{\partial \underline{x}_k}\underline{p}_i\right)\right.\right.\\&\qquad\left.\left.-\frac{e}{c}\left(\frac{\partial \underline{A}_i}{\partial \underline{x}_k}\underline{A}_i+\underline{A}_i\frac{\partial \underline{A}_i}{\partial \underline{x}_k}\right)\right\}-\frac{\partial \underline{V}}{\partial \underline{x}_k}\right\rangle\\&=\left\langle\frac{1}{2m}\frac{e}{c}\sum_i\left\{\left(\underline{p}_i-\frac{e}{c}\underline{A}_i\right)\frac{\partial \underline{A}_i}{\partial \underline{x}_k}\right.\right.\\&\qquad\left.\left.+\frac{\partial \underline{A}_i}{\partial \underline{x}_k}\left(\underline{p}_i-\frac{e}{c}\underline{A}_i\right)\right\}-\frac{\partial \underline{V}}{\partial \underline{x}_k}\right\rangle.\end{aligned} \qquad [13.22]$$

注意这个对称化，为保持厄密性这是必需的.

不用正则形式，我们也能更简单地写出运动方程：

$$\langle m\ddot{\underline{x}}_k\rangle=\left\langle\dot{\underline{p}}_k-\frac{e}{c}\dot{\underline{A}}_k(x)\right\rangle,\qquad \langle m\ddot{\underline{x}}_k\rangle=\langle \underline{K}_k\rangle, \qquad [12.23]$$

这里已用到定义

$$\dot{\underline{F}}=\frac{i}{\hbar}[\underline{H},\underline{F}]+\frac{\partial \underline{F}}{\partial t},$$

而且[13.23]式中

$$\underline{K}_k=-\frac{\partial \underline{V}}{\partial \underline{x}_k}+e\underline{E}_k+\frac{e}{2c}\sum_i(\underline{H}_{ki}\dot{\underline{x}}_i+\dot{\underline{x}}_i\underline{H}_{ki}), \qquad [13.24]$$

其中

$$H_{ki}=\frac{\partial A_i}{\partial x_k}-\frac{\partial A_k}{\partial x_i}, \qquad [13.25]$$

为磁场(写成反对称张量),而

$$E_k=-\frac{1}{c}\frac{\partial A_k}{\partial t} \qquad [13.26]$$

为感生电场①. 方程[12.22]不难从[13.23]和[13.24]两式导出.

若存在磁场,我们也有连续性方程(参见[7.11式):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)+\operatorname{div}\boldsymbol{i}=0, \qquad [13.27]$$

式中几率流密度 $\boldsymbol{i}$ 由下式给出

$$i_k=\frac{1}{2m}\left\{\psi^*\left(p_k-\frac{e}{c}A_k\right)\psi-\psi\left(p_k+\frac{e}{c}A_k\right)\psi^*\right\} \qquad [13.28]$$

或

$$i_k=\frac{h}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_k}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x_k}\right)-\frac{e}{mc}A_k\psi^*\psi. \qquad [13.29]$$

规范不变性

如我们从电动力学②中所已知,可给矢势 A 加上一函数的梯度而并不改变磁场:

$$A_k\to A_k+\frac{\partial f(x,t)}{\partial x_k}. \qquad [13.30]$$

然而,由于[13.24]式③,也必须给势(能) V 加上一附加项:

---

① 原书[13.26]式为 $E_k=-\frac{1}{c}\frac{\partial A_k}{\partial t}-\frac{\partial V}{\partial x_k}$,我们认为有误,已改正. 参见 W. Pauli: *Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik* (*Handbuch der Physik*, Band V, Teil I, S. 27, Springer Berlin, 1958).——中译者注

② 参见 W. Pauli, *Lectures in Physics: Electrodynamics* (M. I. T. Press, Cambridge, Mass. 1972). [中译本:泡利物理学讲义(1973年版),第一册,电动力学,洪铭熙等译,人民教育出版社.——中译者注]

③ 这里中译者对原文有改动. 参见本页注①. ——中译者注

$$V \to V - \frac{e}{c}\frac{\partial f}{\partial t}; \tag{13.31}$$

这意味着,哈密顿算符的形式改变了. 然而,根据波动方程[12.2]可知,ψ 仅有的改变是它乘以如下的相因子:

$$\psi \to \psi \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar}\cdot\frac{e}{c}\cdot f\right]. \tag{13.32}$$

由[13.30], [13.31]和[13.32]三式所定义的变换群称为**规范群**. 相应地, 在这些变换中保持不变的那些量称为**规范不变量**. 几率密度 $\psi^*\psi$ 和几率流密度 i 都是这类量的例子.

作为其他例子, 我们考察维里定理①. 量子理论的表达式

$$\left\langle \frac{m}{2}\frac{d^2}{dt^2}(x_i x_k)\right\rangle = \left\langle \frac{1}{2}(K_i x_k + x_i K_k) + \frac{m}{2}(\dot{x}_i \dot{x}_k + \dot{x}_i \dot{x}_k)\right\rangle \tag{13.33}$$

是根据下列两关系式

$$\frac{d}{dt}(x_i x_k) = \dot{x}_i x_k + x_i \dot{x}_k \tag{13.34}$$

和

$$\frac{d^2}{dt^2}(x_i x_k) = \ddot{x}_i x_k + x_i \ddot{x}_k + \dot{x}_i \dot{x}_k + \dot{x}_i \dot{x}_k \tag{13.35}$$

导出来的;对于 $i=k$, 该表达式简化为

$$\left\langle \frac{m}{2}\frac{d^2}{dt^2}(x_k^2)\right\rangle = \langle K_k x_k + m\dot{x}_k^2\rangle. \tag{13.36}$$

公式[13.33]和[13.36]对经典力学也成立; 只不过量子力学要求 K_k([13.24]式)的对称化形式.

从

① 参见 W. Pauli, *Lectures in Physics: Thermodynamics and Statistical Mechanics*(M. I. T. Press, Cambridge, Mass., 1972). [或参见中译本: 泡利物理学讲义(1973 年版), 第三册, 热力学和气体分子运动论, 苑之方译, 人民教育出版社. ——中译者注]

$$\delta x_i = x_i - \langle x_i \rangle, \qquad [13.37]$$

如所周知，得到

$$\langle (\delta x_i)^2 \rangle = \langle x_i^2 \rangle - (\langle x_i \rangle)^2 \qquad [13.38]$$

和

$$\langle \delta x_i \delta x_k \rangle = \langle x_i x_k \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_k \rangle. \qquad [13.39]$$

利用这些关系，我们能导出更普遍的表达式

$$\left\langle \frac{m}{2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} (\delta x_i \delta x_k) \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} (K_i \delta x_k + \delta x_i K_k) + \frac{m}{2} (\delta \dot{x}_i \delta \dot{x}_k + \delta \dot{x}_i \delta \dot{x}_k) \right\rangle \qquad [13.40]$$

和

$$\left\langle \frac{m}{2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} (\delta x_k)^2 \right\rangle = \langle K_k \delta x_k + m (\delta \dot{x}_k)^2 \rangle. \qquad [13.41]$$

在不受力的情况中($A_k = V = 0$, $m\dot{x}_k = p_k$)，我们又得到类似于[3.20]式的公式:

$$\left\langle \frac{m^2}{2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} (\delta x_k)^2 \right\rangle = \langle (\delta p_k)^2 \rangle. \qquad [13.42]$$

第四章　多粒子问题

§14. 多粒子问题

当存在两个以上粒子时，问题的新特色是粒子间的相互作用. 根据相对论，我们应考虑这些力作用的有限传播速率 c. 于是，在相对论性量子理论中也将考虑到传播的有限速率. 在我们的非相对论近似中，为了简单起见，我们令 $c=\infty$；即，力的作用瞬时地传播到所有的粒子. 因此，我们能够用单一的时间坐标 t，这意味着，不把时间和 $3N$ 个空间坐标同等看待. 我们将假定粒子数 N 为一常数；因此，将不考虑辐射离解过程①.

此后，我们用 $q_1, \cdots, q_f(f=3N)$ 来表示空间坐标：

$$\{x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}, x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \cdots, x_3^{(N)}\}=\{q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, \cdots, q_f\}.$$

同样地，我们用

$$\{p_1, \cdots, p_f\}$$

来表示动量坐标，并定义

$$\mathrm{d}^f q=\mathrm{d}q_1\cdot\mathrm{d}q_2\cdot\cdots\cdot\mathrm{d}q_f;\quad \mathrm{d}^f p=\mathrm{d}p_1\cdot\mathrm{d}p_2\cdot\cdots\cdot\mathrm{d}p_f.$$

此外，我们引入两个广义波函数 $\psi(q_1, \cdots, q_f, t)$ 和 $\varphi(p_1, \cdots, p_f, t)$，它们是这样定义的，使得

$$W(q_1, \cdots, q_f, t)\mathrm{d}^f q=\psi^*\psi\mathrm{d}^f q, \qquad [14.1]$$

$$W(p_1, \cdots, p_f, t)\mathrm{d}^f p=\varphi^*\varphi\mathrm{d}^f p. \qquad [14.2]$$

---

① 参见 W. Pauli, *Lectures in Physics: Selected Topics in Field Quantization* (M. I. T. Press, Cambridge, Mass., 1972). (中译本待出, 人民教育出版社)

这些是发现第 n 个粒子的坐标和动量分别在 q_i 与 $q_i+\mathrm{d}q_i$ 和 p_i 与 $p_i+\mathrm{d}p_i$ 之间的几率($i=3n-2, 3n-1, 3n; n=1, \cdots, N$).

与[4.3]和[4.4]式相似,我们有下列诸关系:

$$\psi(q_1, \cdots, q_f, t)=\frac{1}{(2\pi h)^{f/2}}\int\varphi(p_1, \cdots, p_f, t)\times\exp\left[+\frac{i}{h}(p_1q_1+p_2q_2+\cdots+p_fq_f)\right]\mathrm{d}^f p, \qquad [14.3]$$

$$\varphi(p_1, \cdots, p_f, t)=\frac{1}{(2\pi h)^{f/2}}\int\psi(q_1, \cdots, q_f, t)\times\exp\left[-\frac{i}{h}(p_1q_1+p_2q_2+\cdots+p_fq_f)\right]\mathrm{d}^f q. \qquad [14.4]$$

波函数 ψ 应满足波动方程

$$-\frac{h}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=\underline{H}\psi, \qquad [14.5]$$

式中 H 还是一个线性、厄密算符:

$$\int\psi_1^*\underline{H}\psi_2\mathrm{d}^f q=\int\psi_2(\underline{H}\psi_1)^*\mathrm{d}^f q. \qquad [14.6]$$

推广到 $3N$ 个坐标,在此情况下,下列各关系式也成立:

$$\Delta p_k\cdot\Delta q_k\geqslant\frac{h}{2}, \qquad [14.7]$$

$$p_k\psi\rightarrow\frac{h}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial q_k}\psi, \text{ 和 } q_k\varphi\rightarrow-\frac{h}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial p_k}\varphi. \qquad [14.8]$$

现在我们考察粒子间不存在相互作用的特殊情况,这意味着,哈密顿算符简化为各独立项之和:

$$\underline{H}=\underline{H}^{(1)}+\underline{H}^{(2)}+\cdots+\underline{H}^{(N)}. \qquad [14.9]$$

式中 $\underline{H}^{(i)}$ 只应作用于第 i 个粒子. 若

$$\psi^{(1)}(q_1, q_2, q_3), \cdots, \psi^{(N)}(q_{N-2}, q_{N-1}, q_N) \qquad [14.10]$$

是各孤立系的波动方程

$$-\frac{h}{i}\frac{\partial\psi^{(\alpha)}}{\partial t}=\underline{H}^{(\alpha)}\psi^{(\alpha)} \quad (\alpha=1, 2, \cdots, N) \qquad [14.11]$$

的解，则

$$\psi=\psi^{(1)}\psi^{(2)}\cdots\psi^{(N)} \tag{14.12}$$

是方程

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=\underline{H}\psi=[\underline{H}^{(1)}+\underline{H}^{(2)}+\cdots+\underline{H}^{(N)}]\psi \tag{14.13}$$

的一个特解．通解为乘积[14.12]的线性组合．

因此，哈密顿算符按[14.9]式分解为各独立项，对应于波函数简化为各独立因子的乘积[14.12]，这与下述事实是一致的，即，当各粒子统计地来说是独立的，则几率简化为一个乘积：

$$\left.\begin{aligned}W(q_1,\cdots,q_f,t)&=W_1(x_i^{(1)},t)\cdots W_N(x^{(N)},t)\\W(p_1,\cdots,p_f,t)&=W_1(p^{(1)},t)\cdots W_N(p^{(N)},t)\end{aligned}\right\}. \tag{14.14}$$

所以，我们知道，在外力场中无耦合的粒子的哈密顿算符为(参见[11.3]和[13.20]式)：

$$\underline{H}_0=\sum_{a=1}^{N}\underline{H}^{(a)}; \tag{14.15}$$

$$\underline{H}^{(a)}=-\frac{\hbar^2}{2m^{(a)}}\sum_{k=1}^{3}\left(\frac{\partial}{\partial x_k^{(a)}}-\frac{i}{\hbar}\frac{e^{(a)}}{c}A_k^{(a)}(x^{(a)})\right)^2 +V^{(a)}(x^{(a)}). \tag{14.16}$$

若粒子间的力能由势 $V(q)$ 导出，例如，在库仑相互作用的情况，

$$V(q_1,\cdots,q_f)=\sum_{a<b}\frac{e_a e_b}{r_{ab}}, \tag{14.17}$$

式中 $r_{ab}=|x^{(a)}-x^{(b)}|$，则写成下式是适当的：

$$\underline{H}=\underline{H}_0+\underline{V}(q_1,\cdots,q_f). \tag{14.18}$$

在多粒子情况中，对易关系[13.8]以及公式[13.13]和[13.14]也都成立；唯一需要更改的是，指标 i 和 k 遍历从1至 f 的全部值．

第五章　本征值问题．数学物理函数

在§7中我们已经求解过特殊本征值问题，即势箱中的粒子问题．现在我们有了必要的工具用来探讨在更复杂的力场中粒子的更普遍的本征值问题了．

因为我们寻求本征值问题的稳定解(驻波)，我们用

$$\psi(x,\ t)=u(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right]$$

作为试解，在这种情况下，波动方程[11.7]或[11.8]过渡到定态薛定谔方程①

$$\underline{H}u=Eu. \qquad [\mathrm{I}]$$

现在我们在某些简单情况下求解这个方程．

§15. 线性谐振子．厄密多项式

对于线性谐振子，有熟知的关系

$$\underline{H}=\frac{p^2}{2m}+\frac{m}{2}\omega_0^2q^2=E, \qquad [15.1]$$

$$\left.\begin{array}{l}\dot{p}=-\dfrac{\partial H}{\partial q}=-m\omega_0^2q\\ \dot{q}=\dfrac{\partial H}{\partial p}=\dfrac{p}{m}\end{array}\right\}\rightarrow\ddot{q}+\omega_0^2q=0. \qquad [15.2]$$

从对应于[I]式的[15.1]式，我们得到一维谐振子的定态薛定谔

① 从历史观点来说，应该指出，得到定态薛定谔方程早于含时薛定谔方程式：E. 薛定谔, *Ann. Physik* 79, 361(1926).

方程:

$$-\frac{h^2}{2m}\cdot\frac{d^2u}{dq^2}+\frac{m}{2}\omega_0^2q^2u=Eu. \qquad [15.3]$$

实施坐标变换

$$x=\sqrt{\frac{m\omega_0}{h}}\cdot q, \qquad p_x=\sqrt{\frac{1}{m\omega_0 h}}\cdot p\sim\frac{1}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x}, \qquad [15.4]$$

并令

$$\lambda\equiv\frac{2E}{h\omega_0}, \qquad [15.5]$$

则[15.1]和[15.3]式简化为

$$H=\frac{1}{2}(p_x^2+x^2)h\omega_0, \qquad [15.6]$$

$$-\frac{d^2u}{dx^2}+x^2u=\lambda u, \qquad [15.7]$$

而且对易关系[13.8]就变成

$$\underline{p}_x\underline{x}-\underline{x}\underline{p}_x=\frac{1}{i}. \qquad [15.8]$$

作进一步代换

$$u=y\exp\left[-\frac{x^2}{2}\right], \qquad [15.9]$$

则[15.7]式变成微分方程

$$y''-2xy'+(\lambda-1)y=0, \qquad [15.10]$$

用厄密多项式求解它. n 次厄密多项式由

$$H_n(x)=(-1)^n\cdot\exp[x^2]\cdot\frac{d^n}{dx^n}\exp[-x^2]. \qquad [15.11]$$

给出.

定义

$$\chi=\frac{d^n}{dx^n}\exp[-x^2], \qquad [15.12]$$

于是，用多项式微分法则我们得到

$$\frac{d\chi}{dx}=\frac{d^n}{dx^n}(-2x\exp[-x^2])$$

$$=-2x\frac{d^n}{dx^n}\exp[-x^2]-2n\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}\exp[-x^2], \quad [15.13]$$

$$\frac{d^2\chi}{dx^2}=-2x\frac{d\chi}{dx}-2(n+1)\chi, \quad [15.14]$$

$$\chi''+2x\chi'+2(n+1)\chi=0. \quad [15.15]$$

由

$$y=\exp[x^2]\chi, \quad \chi=\exp[-x^2]y,$$

$$\chi'=\exp[-x^2](y'-2xy),$$

$$\chi''=\exp[-x^2]\{y''-4xy'+(4x^2-2)y\} \quad [15.16]$$

得到

$$y''-2xy'+2ny=0, \quad [15.17]$$

如果选取

$$\lambda=2n+1, \quad [15.18]$$

那么这方程式和[15.10]式等同．用这个结果，可以把 [15.7] 式的解写成

$$h_n(x)=c_n\exp\left[-\frac{x^2}{2}\right]H_n(x), \quad [15.19]$$

式中 c_n 是常数，而本征值为(参看[15.5]式)

$$E_n=\hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right). \quad [15.20]$$

甚至在 $n=0$ 的情况下，也存在不等于零的能量 $E_0=\hbar\omega_0/2$ (零点能！)．现在，我们证明本征函数 $h_n(x)$ 是正交的；即它们满足[7.12]式．按照[15.7]和[15.8]式，得

$$h_n''+(2n+1-x^2)h_n=0,$$

$$h_m''+(2m+1-x^2)h_m=0.$$

用 h_m 乘第一式，$-h_n$ 乘第二式后相加并积分，再用关系式

$$h_m h''_n - h_n h''_m = (h_m h'_n - h_n h'_m)',$$

我们得到，对 $n \neq m$ 有

$$2(n-m)\int h_n h_m \mathrm{d}x = (h_m h'_n - h_n h'_m)\Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0, \qquad [15.21]$$

这就证明了正交性关系的有效性。

在把解归一化之前，必须推导出稍多一些厄密多项式的性质。厄密多项式[15.11]交替地是偶次和奇次的：

$$\left.\begin{array}{ll} H_0(x)=1, & H_1(x)=2x \\ H_2(x)=4x^2-2, & H_3(x)=8x^3-12x \\ H_4(x)=16x^4-48x^2+12, \cdots\cdots & \end{array}\right\} \qquad [15.22]$$

它们的母函数是

$$\begin{aligned} f(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(x)}{n!}t^n \\ &= \exp[x^2]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-t)^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\exp[-x^2] \\ &= \exp[x^2]\exp[-(x-t)^2] = \exp[-t^2+2tx]. \end{aligned} \qquad [15.23]$$

由此，立即得到

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2tf. \qquad [15.24]$$

并由比较各系数，得

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x). \qquad [15.25]$$

由

$$\frac{\partial f}{\partial t} + 2(t-x)f = 0, \qquad [15.26]$$

类似地我们得到

$$xH_n(x) = \frac{1}{2}\cdot H_{n+1}(x) + n\cdot H_{n-1}(x). \qquad [15.27]$$

当然，这些关系([15.25]和[15.27]式)也能从定义[15.11]直接推导出来．由[15.25]得到第 n 阶导数

$$\frac{d^n}{dx^n}H_n(x)=2n\cdot 2(n-1)\cdot \cdots \cdot 2\cdot 1\cdot H_0(x)=2^n n!. \qquad [15.28]$$

通过归一化

$$\int h_n^2(x)dx=c_n^2\int \exp[-x^2]H_n^2(x)dx=1, \qquad [15.29]$$

现在我们可以确定[15.19]式中的常数 c_n.

用[15.11]和[15.28]式我们得到

$$\begin{aligned} c_n^{-2}&=(-1)^n\int H_n(x)\frac{d^n}{dx^n}\exp[-x^2]dx \\ &=\int\frac{d^n H_n(x)}{dx^n}\exp[-x^2]dx=2^n n!\sqrt{\pi}. \end{aligned} \qquad [15.30]$$

通过分部积分 n 次把微分算符往左移，最后，用到由 [15.29] 和 [15.30]式算出的 c_n，解[15.19]为

$$h_n(x)=\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\cdot 2^n n!}}\cdot\exp\left[-\frac{x^2}{2}\right]H_n(x); \qquad [15.31]$$

这个解的相因子仍然是能任意选取的．由[15.27] 和 [15.31]式，我们立即得到

$$xh_n(x)=h_{n+1}(x)\sqrt{\frac{n+1}{2}}+h_{n-1}(x)\sqrt{\frac{n}{2}}; \qquad [15.32]$$

并由[15.25]，[15.31]，和[15.32]式，我们得到

$$\begin{aligned} h_n'(x)&=\sqrt{2n}h_{n-1}(x)-xh_n(x) \\ &=-h_{n+1}(x)\sqrt{\frac{n+1}{2}}+h_{n-1}(x)\sqrt{\frac{n}{2}}. \end{aligned} \qquad [15.33]$$

厄密多项式的完全性

现在我们要证明函数系 $h_n(x)$是完全的；就是说，我们要证明方程式[15.10]

$$y''-2xy'+(\lambda-1)y=0, \qquad [15.34]$$

除 $h_n(x)$ 外没有正则解（即除 $\lambda=2n+1$ 并且 n 为整数外，没有正则解）．为此，我们寻求[15.34]的普遍解，并且证明仅当 $\lambda=2n+1$ 时，解才是正则的．我们取幂级数

$$y=\sum_p a_p x^p, \qquad [15.35]$$

作为试解．因为在 $x=0$ 处是正则点，所以在[15.35]式中不存在负指数．

这里，我们需要表述一个对波动方程 $\underline{H}\psi=E\psi$ 有用的普遍定理：当相互作用势是偶函数（$V(x)=V(-x)$）时，如果象正常情况那样，H 是 p 和 x 的偶函数，那么波动方程的每一个解都是一个偶解和一个奇解之和（借助于波动方程是容易看出的）．

特别是哈密顿函数[15.6]是偶的，并因为 $u=e^{-x^2/2}y$，这定理也适用于[15.34]式的解，即[15.35]能写成具有

$$p=0, 2, 4, \cdots \qquad [15.36]$$

和

$$p=1, 3, 5, \cdots. \qquad [15.37]$$

的两个幂级数之和．把[15.35]式代入[15.34]式，并比较 x^{p-2} 的系数，我们得到二项递推公式

$$a_p\cdot p(p-1)+a_{p-2}\{-2(p-2)+\lambda-1\}=0. \qquad [15.38]$$

令 p_0 是最小的指数；那么，按[15.38]式，有

$$p_0(p_0-1)=0;\quad \underbrace{p_0=0}_{\text{偶解}} \text{ 或 } \underbrace{p_0=1}_{\text{奇解}}.$$

这就证明[15.36]和[15.37]式的初始值是正确的．现在我们要研究幂级数[15.35]何时终止．p_{max} 值必定是幂级数中的最大的指数：

$$a_p=0,\quad p>p_{max}=n;\quad a_n\neq 0. \qquad [15.39]$$

那么，在[15.38]式中用 $p=n+2$，得

$$0=-2n+\lambda-1. \qquad [15.40]$$

即幂级数仅当

$$\lambda=2n+1 \qquad [15.41]$$

时才终止；对于一个给定的 λ 奇数值，是偶解收尾还是奇解收尾则取决于 n 是偶数还是奇数．这样，的确存在一个多项式；对于任何其他的 λ，两个解都不是有尽的．我们现在要阐明无尽级数的收敛性质．由[15.38]式，

$$a_p=a_{p-2}\cdot\frac{2p-3-\lambda}{p(p-1)}, \qquad [15.42]$$

对偶数 p 得

$$a_p=a_0\frac{(1-\lambda)(5-\lambda)(9-\lambda)\cdot\ \cdots\ \cdot(2p-3-\lambda)}{p!}, \qquad [15.43]$$

并且对奇数 p 得

$$a_p=a_1\frac{(3-\lambda)(7-\lambda)\cdot\ \cdots\ \cdot(2p-3-\lambda)}{p!}. \qquad [15.44]$$

对足够大的 p_M，必定有

$$p_M\geqslant\frac{\lambda+3}{2}; \qquad [15.45]$$

于是，对 $p\geqslant p_M$，系数[15.43]和[15.44]不再变号，并且可以选取 $a_p\geqslant 0$．此外，由[15.42]式得

$$\lim_{p\to\infty}p\cdot\frac{a_p}{a_{p-2}}=2. \qquad [15.46]$$

为简单计，我们引进

$$p=2q \text{ 或 } p=2q+1 \qquad (q=0,1,\cdots); \qquad [15.47]$$

于是级数[15.35]变为

$$y=\sum_q a_{2q}x^{2q} \text{ 或 } y=x\sum_q a_{2q+1}x^{2q}. \qquad [15.48]$$

我们不再关心 x 因子以及公式右边的 a_{2q+1} 和 a_q 之间的差别．从

[15.46]式，

$$\lim_{q\to\infty} q\cdot\frac{a_{2q}}{q_{2q-2}}=1,$$

对于给定的 $\delta<1$ 和足够大的 q，我们有

$$q\cdot\frac{a_{2q}}{a_{2q-2}}\geqslant\delta \quad 或 \quad a_{2q}\geqslant\frac{a_{2q-2}\cdot\delta}{q} \tag{15.49}$$

重复应用这些表达式，我们得到

$$a_{2q}\geqslant\frac{c\cdot\delta^{q}}{q!}; \tag{15.50}$$

把这个关系用于[15.48]，我们能写出

$$y=\sum_{q}a_{2q}x^{2q}\geqslant c\cdot\sum_{q}\frac{(\delta\cdot x^{2})^{q}}{q!}=c\cdot\exp[+\delta x^{2}] \tag{15.51}$$

和

$$u=\exp\left[-\frac{x^{2}}{2}\right]y\geqslant c\cdot\exp\left[\left(\delta-\frac{1}{2}\right)x^{2}\right]. \tag{15.52}$$

因为 δ 可以选得任意地接近于1，这样肯定大于 1/2，u的归一化积分就不存在了；即无尽幂级数不给出[15.7]式的可正交归一化的解．$h_n(x)$是 [15.7] 式的唯一正则解，这就完成了完全性的证明．

§16．用线性谐振子来阐明矩阵演算

如果有一完全、正交归一的函数集$\{u_n\}$，

$$\int u_k^{*}u_l\,\mathrm{d}x=\delta_{kl}, \tag{16.1}$$

那么，我们定义算符 $\underline{F}$ 关于 u_n 的矩阵元为

$$(k|\underline{F}|n)=\int u_k^{*}\underline{F}u_n\,\mathrm{d}x. \tag{16.2}$$

量$(k|\underline{F}|n)$是 $\underline{F}$的第 k 行，第 n 列的矩阵元；也标示为$F_{k,n}$．这样，我们已把算符 $\underline{F}$和也用$\underline{F}$表示的矩阵联系起来．下面将通过矩阵和算符的等效性来证明这种记法是正当的．

用[16.2]式可将算符的厄密性条件[12.5]式写成

$$(k|\underline{F}|n) = (n|\underline{F}|k)^*. \qquad [16.3]$$

类推，我们称满足这条件的矩阵是厄密的。

由于[16.1]和[16.2]式，我们可以作下列展开：

$$\underline{F}u_n(x) = \sum_k u_k(x)(k|\underline{F}|n). \qquad [16.4]$$

例如，对算符 $\underline{x}$，我们有

$$\underline{x}u_n(x) = \sum_k u_k(x)(k|\underline{x}|n), \quad (k|\underline{x}|n) = (n|\underline{x}|k)^*; \qquad [16.5]$$

并且对算符 $\underline{p}_x$，我们有

$$-i\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}x} = \sum_k u_k(x)(k|\underline{p}_x|n), \quad (k|\underline{p}_x|n) = (n|\underline{p}_x|k)^*. \qquad [16.6]$$

算符的乘法对应于它所关联的矩阵的乘法；

$$\begin{aligned}\underline{p}_x\{\underline{x}u_n(x)\} &= \sum_k -i\frac{\mathrm{d}u_k}{\mathrm{d}x}(k|\underline{x}|n)\\ &= \sum_l u_l(x)\sum_k (l|\underline{p}_x|k)(k|\underline{x}|n)\\ &= \sum_l u_l(x)(l|\underline{p}_x\underline{x}|n)\end{aligned} \qquad [16.7]$$

是一个例子．这和矩阵乘积通常的定义完全一致：

$$(l|\underline{AB}|n) = \sum_k (l|\underline{A}|k)(k|\underline{B}|n). \qquad [16.8]$$

当然，关系

$$\underline{x}(\underline{p}_x u_n(x)) = \sum_l u_l(x)(l|\underline{x}\underline{p}_x|n) \qquad [16.9]$$

仍然成立，这意味着对易关系[15.8]式在矩阵表象中取

$$\underline{p}_x\underline{x} - \underline{x}\underline{p}_x = (-i)I \qquad [16.10]$$

的形式（I 是单位矩阵，$(k|I|l) = \delta_{kl}$）。

把[15.32]式和展开式[16.5]比较，我们看到，如果按本征函数 $h_n(x)$ 展开，$\underline{x}$ 算符只有两个矩阵元不为零：

$$(n+1|\underline{x}|n)=\sqrt{\frac{n+1}{2}},\qquad [16.11]$$

$$(n-1|\underline{x}|n)=\sqrt{\frac{n}{2}}.\qquad [16.12]$$

由于 $\underline{x}$ 的厄密性，由[16.11]式得出[16.12]式，由[16.12]式也能得出[16.11]式：

$$(n|\underline{x}|n+1)=(n+1|\underline{x}|n)^*=\sqrt{\frac{n+1}{2}}.\qquad [16.13]$$

用代换 $n\to n-1$，由此得出关系式[16.12]．由[15.33]式我们得到 $\underline{p}_x$ 的矩阵元：

$$\underline{p}_x h_n(x)=(-i)\frac{\mathrm{d}h_n(x)}{\mathrm{d}x}=i\sqrt{\frac{n+1}{2}}h_{n+1}(x)$$
$$-i\sqrt{\frac{n}{2}}h_{n-1}(x)=\sum_k h_k(x)(k|\underline{p}_x|n);\qquad [16.14]$$

于是

$$(n+1|\underline{p}_x|n)=i\sqrt{\frac{n+1}{2}},\qquad [16.15]$$

$$(n-1|\underline{p}_x|n)=-i\sqrt{\frac{n}{2}}.\qquad [16.16]$$

全部写出，矩阵为

$$\left.\begin{aligned}
\underline{x}&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\|\begin{matrix}0&\sqrt{1}&0&0&\vdots\\ \sqrt{1}&0&\sqrt{2}&0&\vdots\\ 0&\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&\vdots\\ 0&0&\sqrt{3}&0&\vdots\\ \cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\end{matrix}\right\|\\
\underline{p}_x&=\frac{1}{i\sqrt{2}}\left\|\begin{matrix}0&\sqrt{1}&0&0&\vdots\\ -\sqrt{1}&0&\sqrt{2}&0&\vdots\\ 0&-\sqrt{2}&0&\sqrt{3}&\vdots\\ 0&0&-\sqrt{3}&0&\vdots\\ \cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\end{matrix}\right\|
\end{aligned}\right\}.\qquad [16.17]$$

注意指标是从零开始的. 用

$$\left.\begin{aligned}
\underline{x}^2 &= \frac{1}{2}\left\|\begin{matrix}
1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \vdots \\
0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \vdots \\
\sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \sqrt{12} & \vdots \\
0 & \sqrt{6} & 0 & 7 & 0 & \vdots \\
0 & 0 & \sqrt{12} & 0 & 9 & \vdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots
\end{matrix}\right\| \\
\underline{p}_x^2 &= \frac{1}{2}\left\|\begin{matrix}
1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & \vdots \\
0 & 3 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & \vdots \\
-\sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & -\sqrt{12} & \vdots \\
0 & -\sqrt{6} & 0 & 7 & 0 & \vdots \\
0 & 0 & -\sqrt{12} & 0 & 9 & \vdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots
\end{matrix}\right\|
\end{aligned}\right\}, \qquad [16.18]$$

我们得到哈密顿矩阵(本节的剩余部分, 令 $h\omega_0=1$)①

$$\underline{H} = \frac{1}{2}(\underline{x}^2 + \underline{p}_x^2) = \left\|\begin{matrix}
\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \vdots \\
0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \vdots \\
0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} & \vdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots
\end{matrix}\right\|. \qquad [16.19]$$

按本征函数展开的结果, 哈密顿矩阵是对角的, 而且对角元素是能量的本征值. 以后我们将看到, 这不仅在上述例子中是正确的, 而且更普遍地成立.

---

① 我们把英译本中[16.24]式前这句话提到这里来, 这样在 H 前就没有 $(h\omega_0)^{-1}$ 因子了, 因而和德文原本一致. ——中译者注

为了某些应用,引进下列矩阵也是有用的:

$$\underline{A}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\underline{x}+i\underline{p}_x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)$$

$$=\begin{Vmatrix}0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \vdots\\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \vdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{Vmatrix},$$

$$\underline{A}^*=\frac{1}{\sqrt{2}}(\underline{x}-i\underline{p}_x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(x-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)$$

$$=\begin{Vmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & \vdots\\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \vdots\\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \vdots\\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \vdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{Vmatrix}.$$

那么关系

$$(k|\underline{A}^*|n)=(n|\underline{A}|k)^*$$

成立. 并由对易关系[16.10]得到

$$[\underline{A},\underline{A}^*]\equiv\underline{A}\underline{A}^*-\underline{A}^*\underline{A}=I.$$

a. 薛定谔方程与希尔伯特空间中方程组的等效性

按照[9.2]式, 我们可以按完全正交归一化函数集 $u_n(x)$展开一个任意平方可积函数 $\psi(x)$:

$$\psi(x)=\Sigma u_n(x)\psi_n,\qquad \psi_n=\int\psi(x)u_n^*(x)\mathrm{d}x. \tag{16.20}$$

这样, 在无限维希尔伯特空间中具有分量 ψ_n 的一个矢量与每个函数 $\psi(x)$对应. 在这种情况下, 完全性关系是

$$\int|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=\sum_k|\psi_k|^2, \tag{16.21}$$

由此得出$\sum_k |\psi_k|^2$的存在. 所以，还是应用矩阵乘法规则计算希尔伯特空间的矢量代替计算波函数为好.

如果我们把展开式[16.20]代入薛定谔方程，乘以$u_n^*(x)$，并积分，于是得到

$$\int \mathrm{d}x u_k^*(x) \sum_n \underline{H} u_n(x) \cdot \psi_n = \int \mathrm{d}x u_k^*(x) \sum_n E_n u_n(x) \cdot \psi_n. \qquad [16.22]$$

与[16.2]和[16.4]式结合起来，得到

$$\sum_n \{(k|\underline{H}|n) - E_n(k|I|n)\}\psi_n = 0. \qquad [16.23]$$

未知量ψ_n的无限多个方程式的线性齐次方程组，是完全等价于薛定谔方程的，并给出相同的结果.

b. 例：有附加势的线性谐振子

我们想从下面的考虑来为微扰理论作准备，如果把附加势$V(x)$加到线性谐振子的哈密顿函数H_0上，

$$\underline{H} = \frac{1}{2}(\underline{x}^2 + \underline{p}_x^2) + \underline{V}(x) = \underline{H}_0 + \underline{V}(x), \qquad [16.24]$$

于是对应的薛定谔方程，

$$\underline{H}\psi = E\psi,$$

或其矩阵形式

$$(\underline{H} - E \cdot I)\psi = 0,$$

通常不再是可精确地求解的了. 如果附加势是微小的("微扰")，那末，能求得一个在矩阵表象中特别容易计算的近似解.

因为$h_n(x)$是完全的和正交归一化的，我们能作下列展开：

$$\psi(x) = \sum_n h_n(x)\psi_n, \qquad \psi_n = \int \psi(x) h_n^*(x) \mathrm{d}x, \qquad [16.25]$$

$$V(x)h_n(x)=\sum h_k(x)(k|\underline{V}|n) \\ (k|\underline{V}|n)=\int h_k^*(x)V(x)h_n(x)\mathrm{d}x \Bigg\}, \qquad [16.26]$$

并且存在关系式

$$\int h_k^*(x)h_n(x)\mathrm{d}x=(k|I|n). \qquad [16.27]$$

象我们处理[16.22]式那样，把这展开式代入薛定谔方程，乘以$h_k^*(x)$，并积分：

$$\int \mathrm{d}x h_k^*(x)\sum_n\{(\underline{H}_0-E)h_n(x)+\underline{V}(x)h_n(x)\}\psi_n=0.$$

于是我们得到

$$\sum_n\left\{\left(n+\frac{1}{2}-E\right)(k|I|n)-(k|\underline{V}|n)\right\}\psi_n=0. \qquad [16.28]$$

这又是等效于薛定谔方程的未知量ψ_n的无限多个方程式的方程组。以后当我们考虑微扰论时，将求解这个方程组。

c. 用矩阵法确定线性谐振子的本征值

刚才我们已由波动方程导出量子力学的矩阵表象，并已证明，这两种表象是完全等效的。然而，历史上矩阵力学在波动力学①之前就发展起来了，并且最初全然没有注意到这两种理论的同一性。

作为毫不依赖于波动方程的矩阵力学计算的例子，我们再来论述线性谐振子。这样，在线性谐振子的哈密顿矩阵

① W.海森伯(*Z. Physik* **33**, 879(1925))引进矩阵元作为经典力学的傅里叶振幅的量子力学类似量。正如经典力学量由其傅里叶振幅所确定那样，那么，对应的量子力学量也应由对应的矩阵元素集给出来。(虽然对应于傅里叶积分的形式，对于矩阵元是不可能的。)然而，海森伯在他的第一篇论文中尚没有用"矩阵元"这个术语，玻恩和约旦(*Z. Physik* **34**, 858(1925))是首先看出海森伯给出的量子力学的乘法规则和矩阵乘法规律是完全相同的。用矩阵演算还能更好地建立和发展全部理论(M. Born, W. Heisenberg *and* P. Jordan, *Z. Physik* **35**, 557(1926))。

$$\underline{H} = \frac{1}{2}(\underline{p}_x^2 + \underline{x}^2) \qquad [16.29]$$

中，例如，$\underline{x}^2$ 代表矩阵

$$(n|x^2|n') = \sum_k (n|x|k)(k|x|n'),$$

我们必须用厄密矩阵代替 $\underline{x}$ 和 $\underline{p}_x$ 使得 $\underline{H}$ 成为对角的．此外，$\underline{x}$ 和 $\underline{p}_x$ 必须服从对易关系[13.13]和[13.14]式，当然这些关系能够在矩阵力学的结构中推导出来．在我们的特殊坐标[15.4]式中，对易关系是

$$\underline{H}\underline{p}_x - \underline{p}_x\underline{H} = i\frac{\partial \underline{H}}{\partial \underline{x}} = +i\underline{x}, \qquad [16.30]$$

$$\underline{H}\underline{x} - \underline{x}\underline{H} = -i\frac{\partial \underline{H}}{\partial \underline{p}_x} = -i\underline{p}_x. \qquad [16.31]$$

如果我们现在假设，作为 $\underline{x}$ 和 $\underline{p}_x$ 正确选取的结果，$\underline{H} = \underline{E}$ 已经是对角的，那么，这样的对易子就变为

$$(n'|\underline{H}\underline{F} - \underline{F}\underline{H}|n'') = (E_{n'} - E_{n''})(n'|\underline{F}|n'').$$

（泡利："…算算它！"），用[16.30]和[16.31]式，上式给出

$$(E_{n'} - E_{n''})(n'|\underline{p}_x|n'') = i(n'|\underline{x}|n''),$$

$$(E_{n'} - E_{n''})(n'|\underline{x}|n'') = -i(n'|\underline{p}_x|n'').$$

所以，要么$(n'|p_x|n'')$和$(n'|x|n'')$两者都等于零，要么都不等于零；后一种情况中，由于

$$(E_{n'} - E_{n''})^2(n'|\underline{x}|n'') = (n'|\underline{x}|n''),$$

我们有

$$(E_{n'} - E_{n''})^2 = 1, \quad \text{或} \quad E_{n'} - E_{n''} = \pm 1. \qquad [16.32]$$

因为线性谐振子的本征值是非简并的，在矩阵力学的结构中也不难看出，由[16.32]式得到选择定则①

---

① 只有那些指标服从"选择定则"的矩阵元才不等于零．我们以后将看到，光发射的强度是正比于与发射跃迁相关联的矩阵元的平方．这样，选择定则指出哪些态之间的跃迁是可能的．

$$n'-n''=\pm 1;\qquad [16.33]$$

同时我们已经固定了本征值编号的顺序:

$$E_n=n+\text{常数}.\qquad [16.34]$$

用这编号,只有矩阵元

$$(n|\underline{x}|n+1),(n|\underline{x}|n-1),(n|\underline{p}_x|n+1),(n|\underline{p}_x|n-1).$$

不为零;其他全部都等于零. 由上面的关系,现在得到

$$(n|\underline{p}_x|n\mp 1)=\pm i(n|\underline{x}|n\mp 1).\qquad [16.35]$$

我们尚未完全证明[16.34]式的写法是正确的. 我们必须首先证明,由 E_n 形成的序列是没有空缺的;就是说,我们必须证明,紧接着每个 E_n 的下一个较大的能量是 $E_{n+1}=E_n+1$. 为此,我们考虑对易子[16.10]的对角元素,

$$i(n|\underline{p}_x\underline{x}-\underline{x}\underline{p}_x|n)=2\{(n|\underline{x}|n+1)(n+1|\underline{x}|n)$$
$$-(n|\underline{x}|n-1)(n-1|\underline{x}|n)\}=1;\qquad [16.36]$$

在得到这对易子的表达式时我们已用到了[16.35]式. 由于 $\underline{x}$ 的厄密性,由[16.36]我们得到

$$|(n|\underline{x}|n+1)|^2-|(n|\underline{x}|n-1)|^2=\frac{1}{2},\qquad [16.37]$$

就是说,有

$$|(n|\underline{x}|n-1)|^2=\frac{n}{2}+\text{常数},\qquad [16.38]$$

因为这意味着

$$|(n|\underline{x}|n+1)|^2=|(n+1|\underline{x}|n)|^2=\frac{n+1}{2}+\text{常数}.$$

于是便导致[16.37]式. 用公式[16.35]和 $\underline{x}$ 及 $\underline{p}_x$ 的厄密性,我们也得到

$$(n|\underline{p}_x^2|n)=(n|\underline{x}^2|n)$$
$$=|(n|\underline{x}|n-1)|^2+|(n|\underline{x}|n+1)|^2,\qquad [16.39]$$

用它,于是由[16.29]式得到

$$E_n=|(n|\underline{x}|n-1)|^2+|(n|\underline{x}|n+1)|^2=n+\text{常数}. \quad [16.40]$$

这方程式的左端又是正的．所以，必定存在一个最小的 $n=n_0$ 致使 $n<n_0$ 时 $E_n\equiv0$．因为直到现在我们仅规定了编号的顺序，我们可以取 $n_0=0$．于是，我们有 $E_{-1}=0$，这意味着

$$(-1|\underline{x}|0)=0;$$

和[16.37]式一起给出

$$E_0=\frac{1}{2} \quad \text{和} \quad E_n=n+\frac{1}{2}. \quad [16.41]$$

E_0 是著名的零点能．我们现在也已用矩阵方法把它正确地推导出来了（参看[15.20]）．

§17. 平面中的谐振子．简并性

平面中的各向同性谐振子有势

$$V(q_1, q_2)=\frac{m}{2}\omega_0^2(q_1^2+q_2^2), \quad [17.1]$$

它导致薛定谔方程

$$\frac{d^2u}{dx_1^2}+\frac{d^2u}{dx_2^2}+(\lambda-x_1^2-x_2^2)u=0, \quad [17.2]$$

其中

$$\lambda=2E/\hbar\omega_0 \quad \text{和} \quad x_i=\sqrt{m\omega_0/\hbar}\cdot q_i.$$

（参看[15.4]和[15.5]式．）

方程式[17.2]是 x_1 和 x_2 的两个方程式之和．所以，解变为乘积

$$u=h_{n_1}(x_1)\cdot h_{n_2}(x_2), \quad [17.3]$$

以及本征值为

$$\lambda=\lambda_1+\lambda_2=2n_1+1+2n_2+1$$
$$=2(n_1+n_2+1)=2(n+1). \quad [17.4]$$

（如果解是这种形式的乘积，我们说方程式是可分离的．）这里，有几个不同的态对应于同一个本征值的情况，称为简并．如果 n 个

态属于同一个本征值，称为 n 重简并．在我们的情况中，简并度是 $(n+1)$ 重的：

$$
\begin{array}{lcccccc}
n_1: & 0, & 1, & 2, & \cdots, & n, \\
n_2: & n, & n-1, & n-2, & \cdots, & 0, \\
n=n_1+n_2 \text{①}: & n, & n, & n, & \cdots, & n.
\end{array}
$$

如果对势加以适当的更换，例如，变成各向异性谐振子：

$$V(q_1, q_2)=\frac{m}{2}(\omega_1^2 q_1^2+\omega_2^2 q_2^2), \tag{17.5}$$

我们就能消除这简并性．方程式仍然是可分离的，而且其解是

$$u=h_{n_1}\left(\sqrt{\frac{m\omega_1}{h}}q_1\right)\cdot h_{n_2}\left(\sqrt{\frac{m\omega_2}{h}}q_2\right), \tag{17.6}$$

并且

$$E=h\left\{\omega_1\left(n_1+\frac{1}{2}\right)+\omega_2\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\right\}. \tag{17.7}$$

如果 ω_1/ω_2 是无理数(ω_1 和 ω_2 是不可通约的)，于是，简并消除了．

通过极限过渡 $\omega_1/\omega_2\to 1$，我们又得到各向同性的谐振子了．一般说来，可以想象从各种可分离的非简并系，通常作为极限情况而得到一个简并系；就是说，在各种坐标系中，简并系都是可分离的．

a．极坐标中平面谐振子的解

例如，在极坐标中各向同性的谐振子也是可分离的：

$$x_1=r\cos\varphi,\ x_2=r\sin\varphi,\ dx_1dx_2=rdrd\varphi, \tag{17.8}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)u=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}$$
$$=\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}. \tag{17.9}$$

---

① 德文原本有这一行．——中译者注

于是薛定谔方程为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}+(\lambda-r^2)u=0. \qquad [17.10]$$

其解可分离为

$$u=v_m(r)e^{im\varphi} \qquad [17.11]$$

形式的乘积，其中m是正的或负的整数；于是 $v_m(r)$ 的微分方程是

$$\frac{d^2 v_m}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dv_m}{dr}-\frac{m^2}{r^2}v_m+(\lambda-r^2)v_m=0. \qquad [17.12]$$

因为坐标变换不改变一个系统的能量值，简并度必定和[17.4]式一样；另一方面，本征函数是不同的．的确，甚至在一个坐标系中也可以取其线性组合而使它们变成很不相同．也可以通过过渡到各向同性非谐振子消除简并：

$$V(r)①=\frac{1}{2}r^2+\varepsilon\overline{V}(r). \qquad [17.13]$$

ε 应是不与 r^2 成比例的小数．可分离性[17.11]并未改变，并且类似于[17.12]式，我们得到

$$\frac{d^2 v_m}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dv_m}{dr}-\frac{m^2}{r^2}v_m+(\lambda-r^2-2\varepsilon\overline{V}(r))v_m=0. \quad [17.14]$$

这方程式的本征值对 $\pm m$ 还是二重简并的，为了消除这一简并，我们必须引进磁场．

现在，我们要求解方程式[17.12]．因为r在物理上的容许范围是$0\leqslant r\leqslant\infty$．通过坐标变换

$$r^2=x, \qquad r=\sqrt{x}, \qquad r\frac{\partial}{\partial r}=2x\frac{\partial}{\partial x}; \qquad [17.15]$$

我们可以简化[17.12]式．于是得到

---

① 英文译本是$(\hbar\omega_0)^{-1}V(r)=(1/2)r^2+\varepsilon\overline{V}(r)$．如果从§16中[16.19]式起，令$\hbar\omega_0=1$，那么[17.13]式应写成$V(r)=(1/2)r^2+\varepsilon\overline{V}(r)$，因而与德文原本一致．——中译者注

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right)=2\frac{\partial}{\partial x}\left(2x\frac{\partial u}{\partial x}\right)=4\left(x\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial u}{\partial x}\right),$$

$$x\frac{\mathrm{d}^2 v_m}{\mathrm{d}x^2}+\frac{\mathrm{d}v_m}{\mathrm{d}x}-\frac{m^2}{4x}v_m+\frac{\lambda-x}{4}v_m=0. \qquad [17.16]$$

用 $\mathrm{d}y/\mathrm{d}x=y'$ 和下列诸代换

$$v_m=x^{|m|/2}e^{-x/2}y, \qquad [17.17]$$

$$v_m'=e^{-x/2}x^{|m|/2}\left\{y'+y\left(\frac{m}{2x}-\frac{1}{2}\right)\right\},$$

$$v_m''=e^{-x/2}x^{|m|/2}\left\{y''+2\left(\frac{m}{2x}-\frac{1}{2}\right)y'-\frac{m}{2x^2}y+\left(\frac{m}{2x}-\frac{1}{2}\right)^2 y\right\},$$

我们可以把[17.16]式写成

$$y''+\left(\frac{m+1}{x}-1\right)y'+\frac{1}{2x}\left(\frac{\lambda}{2}-m-1\right)y=0 \qquad [17.18]$$

或

$$xy''+(m+1-x)y'+ky=0, \qquad [17.19]$$

其中

$$k=\frac{1}{2}\left(\frac{\lambda}{2}-m-1\right).$$

由于关系式[17.4]，我们也有

$$n=2k+m.$$

我们来探讨 m 和 k 是整数但不是负的情况. 对一般微分方程[17.19]的论述只有 $k=0, 1, 2, \cdots$ 时才得出物理上有用的解.

下面我们要讨论求解方程式[17.19]要用到的某些函数.

b. 拉盖尔多项式

拉盖尔多项式定义为

$$L_k(x)=e^x\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}(x^k e^{-x})=\sum_{n=0}^{k}(-1)^n\binom{k}{n}k(k-1)\cdot\cdots\cdot(n+1)\cdot x^n, \qquad [17.20]$$

并且它们满足 $m=0$ 的微分方程[17.19]

$$xL_k'' + (1-x)L_k' + kL_k = 0. \qquad [17.21]$$

例如，这可以用拉盖尔多项式的母函数

$$f(x, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{L_k(x)}{k!} z^k = \frac{\exp[-xz/(1-z)]}{1-z}$$

来证明．在[17.35]式中我们将全面地推导出这个母函数．对 x 和 z 微分，并比较其系数，得出

$$L_k' - kL_{k-1}' = -kL_{k-1}, \qquad [17.22]$$

$$L_{k+1} = (2k+1-x)L_k - k^2 L_{k-1}. \qquad [17.23]$$

由此立即得到微分方程[17.21]（把[17.23]式中的 L_{k-1} 代入[17.22]式，并用关系式 $L_{k+1}' - (k+1)L_k' = -(k+1)L_k$ 消去 L_{k+1}）.

用定义

$$L_k^m \equiv \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_k, \qquad [17.24]$$

通过微分[17.21]式 m 次，我们得到

$$x(L_k^m)'' + (m+1-x)(L_k^m)' + (k-m)L_k^m = 0. \qquad [17.25]$$

如果在这个方程式中用 $k+m$ 代换 k，那么我们正好得到微分方程[17.19]，这就证明

$$L_{k+m}^m \equiv \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} L_{k+m} \qquad [17.26]$$

满足 $m \geqslant 0$ 的[17.19]式了.

所以，方程[17.16]（以及我们用以入手的对应方程[17.12]）的解是

$$v_{k,m} = 常数 \times e^{m/2} e^{-x/2} L_{k+m}^m(x). \qquad [17.27]$$

我们将在[17.38]式中归一化这个解．并且在[17.57][①] 式中把它推广到超几何函数中去.

L_{k+m}^m 是正交函数集；即，它们满足

① 英译本误为[17.37]．——中译者注

$$\int L_{k+m}^{m} L_{k'+m}^{m}\, \mathrm{d}x=0, \qquad k \neq k', \tag{17.28}$$

无论何人通过运算都能确信这一点.

把从函数论得来的著名公式

$$f^{(k)}(x)=\frac{k!}{2\pi i}\oint_C \frac{f(t)}{(t-x)^{k+1}}\mathrm{d}t, \tag{17.29}$$

应用于 $f(x)=x^k e^{-x}$, 式中 $k\geqslant 0$, C 是一个围绕 x 的圆, 并用[17.20], 我们得到

$$L_k(x)=e^x k!\frac{1}{2\pi i}\oint_C \frac{e^{-t}t^k}{(t-x)^{k+1}}\mathrm{d}t. \tag{17.30}$$

用 $-t+x$ 代换 t, 上式可以写成

$$L_k(x)=\frac{k!}{2\pi i}\oint_C e^t (t-x)^k t^{-(k+1)}\mathrm{d}t. \tag{17.31}$$

用 $k+m$ 代换 k, 并且对 x 微分 m 次, 我们也得到 L_{k+m}^{m} 类似的表达式:

$$L_{k+m}^{m}=\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}L_{k+m}=(-1)^m\frac{[(k+m)!]^2}{k!}$$

$$\times\frac{1}{2\pi i}\oint_C e^t (t-x)^k t^{-(k+m+1)}\mathrm{d}t. \tag{17.32}$$

我们要用这个实用的积分表示来推导拉盖尔多项式的母函数:

$$f(x,z)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{L_k(x)}{k!}z^k=\frac{1}{2\pi i}\oint_C e^t\sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{t-x}{t}z\right)^k\frac{\mathrm{d}t}{t}. \tag{17.33}$$

我们可假设 $|z|<1$; 在这样情况下, 保证级数在 t 充分大时收敛:

$$\left|\frac{t-x}{t}\right|\cdot|z|<1.$$

计算得出

$$f(x,z)=\frac{1}{2\pi i}\oint e^t\frac{1}{\left(1-\frac{t-x}{t}z\right)}\cdot\frac{\mathrm{d}t}{t}=\frac{1}{2\pi i}\oint e^t\frac{\mathrm{d}t}{t-(t-x)z}$$

$$=\frac{1}{1-z}\cdot\frac{1}{2\pi i}\oint e^{t}\frac{\mathrm{d}t}{t+\frac{xz}{1-z}}.\qquad [17.34]$$

被积函数在 $t=-(xz)/(1-z)$处有一个单极点. 所以积分等于留数的 $2\pi i$ 倍, 或

$$2\pi i\exp\left[-\frac{xz}{1-z}\right],$$

而且最后的结果是

$$f(x,z)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{L_k(x)}{k!}z^k=\frac{\exp[-xz/(1-z)]}{1-z}.\qquad [17.35]$$

只要把上式对 x 微分 m 次便得到 L^m_{k+m} 的母函数:

$$\sum_{k=m}^{\infty}\frac{L^m_k(x)}{k!}z^k=(-1)^m z^m\frac{\exp[-xz/(1-z)]}{(1-z)^{m+1}}.$$

用 $k+m$ 代换 k, 于是得出

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{L^m_{k+m}(x)}{(k+m)!}z^k=(-1)^m\frac{\exp[-xz/(1-z)]}{(1-z)^{m+1}}.\qquad [17.36]$$

c. 解[17.27]的归一化

现在, 我们要归一化由[17.27]给出的方程式[17.16]的解

$$v_{k,m}(x)=常数\times x^{\frac{m}{2}}e^{-\frac{x}{2}}L^m_{k+m}(x),\qquad [17.37]$$

并且同时证明它的正交性. 我们用薛定谔的优美的方法计算归一化积分,

$$\int_0^{\infty}v_{k,m}v_{k',m}\mathrm{d}x=\int_0^{\infty}x^m e^{-x}L^m_{k+m}(x)L^m_{k'+m}(x)\mathrm{d}x=N_{km}\delta_{kk'},$$

$$[17.38]$$

(象刚才推导出的母函数那样)这种方法完全可以普遍地应用. 为此, 我们用如下形式的[17.36]式

$$\sum_{k'=0}^{\infty}\frac{L_{k'+m}^{m}(x)}{(k'+m)!}t^{k'}=(-1)^{m}\frac{\exp[-xt/(1-t)]}{(1-t)^{m+1}}, \quad [17.39]$$

并把[17.36],[17.39]式和 $e^{m}e^{-x}$ 三者的乘积对 x 积分:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{k'=0}^{\infty}\frac{z^{k}t^{k'}}{(k+m)!(k'+m)!}\int_{0}^{\infty}x^{m}\exp[-x]L_{k+m}^{m}(x)L_{k'+m}^{m}(x)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{(1-z)^{m+1}}\cdot\frac{1}{(1-t)^{m+1}}\int_{0}^{\infty}x^{m}\exp\{-x(1-zt)/[(1-t)(1-z)]\}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{(1-zt)^{m+1}}\int_{0}^{\infty}y^{m}\exp[-y]\mathrm{d}y=\frac{m!}{(1-zt)^{m+1}}$$

$$=m!\sum_{k=0}^{\infty}\binom{-m-1}{k}(-1)^{k}(zt)^{k}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(k+m)!}{k!}(zt)^{k}. \quad [17.40]$$

为了这个计算,我们用了下列关系

$$y=x\frac{1-zt}{(1-z)(1-t)}, \qquad \int_{0}^{\infty}y^{m}e^{-y}\mathrm{d}y=m!,$$

$$(-1)^{k}\binom{-m-1}{k}$$

$$=\frac{(m+1)(m+2)\cdots\cdots(m+k)}{k!}=\frac{(m+k)!}{k!m!}. \quad [17.41]$$

比较[17.40]式的系数,我们发现公式[17.38]为

$$N_{k,m}=\frac{[(k+m)!]^{3}}{k!} \quad [17.42]$$

所满足. 的确,等式右端 $k\neq k'$ 的 $z^{k}t^{k'}$ 各项的系数皆为零;由此得出正交性.

注:对于非整数的 α,我们也定义

$$\binom{\alpha}{n}\equiv\frac{\alpha(\alpha-1)\cdots\cdots(\alpha-n+1)}{n!}. \quad [17.43]$$

在这种意义下,公式[17.41]是正确的:

$$\binom{-\alpha}{n}(-1)^{n}=\frac{\alpha(\alpha+1)\cdots\cdots(\alpha+n-1)}{n!}=\frac{\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(\alpha)\cdot n!}. \quad [17.44]$$

d. **Γ 函数的一些性质**

这里我们把今后需要的 Γ 函数的一些性质收集在一起. Γ 函数满足著名的函数方程:

$$\Gamma(z+1)=z\Gamma(z), \qquad [17.45]$$

$$\Gamma(z)\cdot\Gamma(1-z)=\frac{\pi}{\sin\pi z}. \qquad [17.46]$$

如果 $z=n(n=0,1,2,\cdots)$, 由于 $\Gamma(1)=1$, 第一个方程式变为

$$\Gamma(n+1)=n!. \qquad [17.47]$$

$\Gamma(z)$ 在 $z=0,-1,-2,\cdots$ 处有单极点, 而在其他各处是正则的; $1/\Gamma(z)$ 是一个解析超越函数(超越整函数). Γ 函数具有欧拉积分表示

$$\Gamma(z+1)=\int_0^\infty e^{-t}t^z\mathrm{d}t, \quad 对\ \mathrm{Re}(z)>-1. \qquad [17.48]$$

此外, 还有一个简单、有用而优美的汉开尔关系,

$$\frac{1}{\Gamma(z)}=\frac{1}{2\pi i}\int_C e^t t^{-z}\mathrm{d}t \quad 对全部 z, \qquad [17.49]$$

其中, 积分路径 C 绕过原点且在 $-\infty$ 处向实轴会聚, 如图 17.1 所示. 两个积分表示中任一个可以用 [17.46] 式变换成另一个. 由于[17.45]式, 关系式

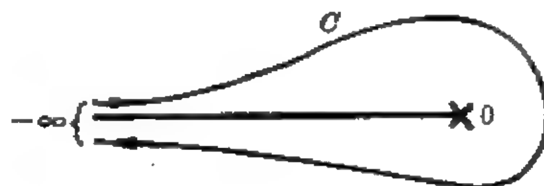


图 17.1

$$\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma+n)}=\frac{1}{\gamma(\gamma+1)\cdot\cdots\cdot(\gamma+n-1)} \qquad [17.50]$$

也成立.

e. **合流超几何函数**

一般的微分方程(参看[17.19]式, $m+1\to\gamma$, $k\to-\alpha$)

$$xy''+(\gamma-x)y'-\alpha y=0, \qquad [17.51]$$

(其中 α, γ, 和 x 可以是任意实量或复量,)导致合流超几何函数

$F(\alpha, \gamma, x)$，它是一般的超几何函数 $F(\alpha, \beta, \gamma, x)$①的一种极限情况：

$$F(\alpha, \gamma, x)=\lim_{\beta\to\infty}F\left(\alpha, \beta, \gamma, \frac{x}{\beta}\right).$$

首先，我们要推导一种超几何函数的积分表示，然后考察其渐近行为．我们用级数

$$y=\sum_{n=0}^{\infty}a_n x^n \qquad [17.52]$$

作为试解来求解[17.51]式．比较 x^n 的系数，我们得到递推公式

$$(n+1)na_{n+1}+\gamma(n+1)a_{n+1}-na_n-\alpha a_n=0,$$

$$a_{n+1}=\frac{\alpha+n}{\gamma+n}\cdot\frac{1}{n+1}\cdot a_n. \qquad [17.53]$$

为了使这解不恒等于零，我们必须假设 $a_0\neq 0$．由[17.53]也容易看出，对 $\gamma=0$ 和负整数，不存在[17.52]形式的解．如果设 $a_0=1$，那么解为

$$F(\alpha, \gamma, x)=1+\frac{\alpha}{1!\gamma}x+\frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\gamma(\gamma+1)}x^2+\cdots$$

$$+\frac{\alpha(\alpha+1)\cdots(\alpha+n-1)}{n!\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+n-1)}x^n+\cdots. \qquad [17.54]$$

对于 $\alpha=0, -1, -2, \cdots, -k, \cdots$，级数中断，这意味着 $F(-k, \gamma, x)$ 是一个多项式；我们立即看出，对 $\gamma=m+1$，事实上这些就是拉盖

---

① 用超几何级数

$$F(a, b, c, z)=1+\frac{ab}{1!c}z+\frac{a(a+1)b(b+1)}{2!c(c+1)}z^2+\cdots,$$

定义一般超几何函数，其中全部量可以是复量．对 $|z|<1$ 级数是绝对收敛的，但对 $|z|>1$ 是发散的；如果 $\mathrm{Re}(a+b-c)<0$，则对 $|z|=1$，它也是绝对收敛的．超几何函数满足方程式

$$z(1-z)\frac{d^2u}{dz^2}+\{c-(a+b+1)z\}\frac{du}{dz}-abu=0.$$

尔多项式.

用[17.44]和[17.49]式可以把这个解变换成一个积分:

$$F(\alpha,\gamma,x)=\Gamma(\gamma)\sum_{n=0}^{\infty}\binom{-\alpha}{n}\frac{(-x)^n}{\Gamma(\gamma+n)}$$

$$=\Gamma(\gamma)\frac{1}{2\pi i}\int_C e^t\sum_{n=0}^{\infty}\binom{-\alpha}{n}t^{-\gamma}\left(\frac{-x}{t}\right)^n\mathrm{d}t.$$

为了使级数收敛,必须要求

$$\left|\frac{x}{t}\right|<1, \qquad [17.55]$$

这意味着积分路径 C(参看公式[17.49])必须包围 x 点和原点(图 17.2).

用二项式定理,

$$\sum_{n=0}^{\infty}\binom{-\alpha}{n}\left(\frac{-x}{t}\right)^n=\left(1-\frac{x}{t}\right)^{\alpha},$$

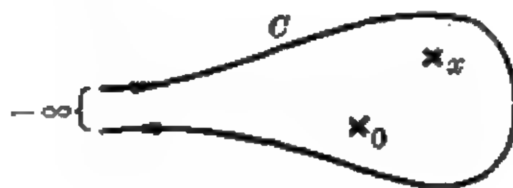


图 17.2

我们得到

$$F(\alpha,\gamma,x)=\frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i}\int_C e^t t^{\alpha-\gamma}(t-x)^{-\alpha}\mathrm{d}t. \qquad [17.56]$$

把

$$\gamma=m+1, \qquad \alpha=-k$$

代入这公式(在这种情况下,[17.51]式变为[17.19]式),我们又得到[17.32]式的拉盖尔多项式;唯一的差别是它们的归一化不同:

$$L_{k-m}^{m}①(x)=\frac{[(k+m)!]^2(-1)^m}{k!}\frac{1}{2\pi i}\int_C e^t t^{-(k+m+1)}(t-x)^k\mathrm{d}t$$

$$=(-1)^m\binom{k+m}{m}(k+m)!F(-k,m+1,x). \qquad [17.57]$$

---

① 英译本误为 L_{k+}^{m}.——中译者注

现在我们要核对我们导出的解[17.56]，实际上满足合流超几何函数的微分方程[17.51]．为此，我们写出恒等式

$$
\begin{aligned}
& xF''+(\gamma-x)F'-\alpha F \\
& \equiv\frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i}(-\alpha)\int_C \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[e^t t^{\alpha-\gamma+1}(t-x)^{-\alpha-1}\right]\mathrm{d}t,
\end{aligned}
\qquad [17.58]
$$

借助于[17.56]式和关系式

$$
\begin{aligned}
& e^t t^{\alpha-\gamma}(t-x)^{-\alpha}\left\{\frac{(-\alpha)(-\alpha-1)}{(t-x)^2}x+(\gamma-x)\frac{\alpha}{t-x}-\alpha\right\} \\
& = e^t t^{\alpha-\gamma}(t-x)^{-\alpha-1}(-\alpha)\left\{(-\alpha-1)\frac{t}{t-x}+(\alpha+1-\gamma)+t\right\} \\
& =\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{e^t t^{\alpha-\gamma+1}(1-x)^{-\alpha-1}\},
\end{aligned}
$$

可以立即把它推导出来．我们知道，积分路径 C（参看图 17.1）从 $-\infty$，绕过原点，又回到 $-\infty$．然而，在端点 $-\infty$ 处，积分为零．所以恒等式的右端等于零．这便证明满足这方程式了．

如图 17.3 所示，如果把积分路径 C 拆开，那么，我们有

$$
\begin{array}{ccccc}
\int_C & = & \int_{C_1} & + & \int_{C_2}, \\
\downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
F & = & F_1 & + & F_2
\end{array}
$$

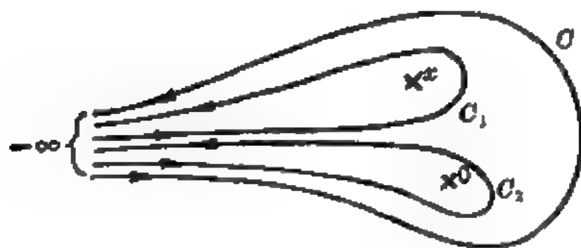


图 17.3

其中

$$
F_{\frac{1}{2}}=\frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i}\int_{\substack{C_1\\C_2}} e^t t^{\alpha-\gamma}(t-x)^{-\alpha}\mathrm{d}t. \qquad [17.59]
$$

根据[17.58]式，因为积分的端点全部是在$-\infty$处，因此F_1和F_2都是微分方程[17.51]的解．这样，我们已把[17.56]式给出的解分解为两个独立的解F_1和F_2．如果$-\alpha=k=0,\ 1, 2, \cdots$，那么，原点处最多有一个极点，并且

$$F_1=0, \qquad F=F_2;$$

对于$\gamma=m+1>-k$，这又给出拉盖尔多项式．另一方面，如果原点是正则点，意思是$\alpha-\gamma$是整数并且是非负数，那么，我们得到

$$F_2=0, \qquad F=F_1.$$

f．合流超几何函数的渐近行为

借助于刚才引进的积分，我们研究$F(\alpha, \gamma, x)$在大$|x|$处的行为．

首先，我们计算F_2．对于大$|x|$，我们可以用展开式

$$(t-x)^{-\alpha}=(-x)^{-\alpha}\left(1-\frac{t}{x}\right)^{-\alpha}$$

$$=(-x)^{-\alpha}\left(1+\alpha\frac{t}{x}+\cdots\right). \qquad [17.60]$$

由[17.49]式

$$\frac{1}{2\pi i}\int_C e^t t^{\alpha-\gamma}\mathrm{d}t=\frac{1}{\Gamma(\gamma-\alpha)}, \qquad [17.61]$$

并利用[17.45]

$$\frac{1}{\Gamma(\gamma-\alpha-1)}=\frac{1}{\Gamma(\gamma-\alpha)}(\gamma-\alpha-1),$$

我们得到

$$F_2=\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}(-x)^{-\alpha}\left\{1-\frac{\alpha(\alpha-\gamma+1)}{x}+\cdots\right\}. \qquad [17.62]$$

然而，在这个推导中的某一点上我们“被骗”了，因为仅在积分路径(参看图17.3)的一部分上满足展开式[17.60]的收敛条件$|t/x|<$

1. 所以我们这里不得不涉及所谓渐近级数[①]. 我们在这种级数中一定不要取太多项; 否则近似程度反而又变差了. 对于 $\gamma-\alpha$ 是负整数, 由渐近公式[17.62]也能得到 $F_2=0$.

F_1 的展开式是完全类似的. 我们只需作代换

$$t-x=\tau,$$

便得到

$$F_1(\alpha,\gamma,x)=\frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i}e^x\int_{C_2}e^\tau(x+\tau)^{\alpha-\gamma}\tau^{-\alpha}d\tau. \qquad [17.63]$$

如果在被积函数中用 $(\alpha-\gamma)$ 代换 $-\alpha$, 和 $-x$ 代换 $+x$. 这积分在形式上和[17.59]式中的一个积分相同. 用这些代换, 由[17.62]式我们可以立即写下这个解

$$F_1(\alpha,\gamma,x)=\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}e^x x^{\alpha-\gamma}\left\{1+\frac{(1-\alpha)(\gamma-\alpha)}{x}+\cdots\right\}. \qquad [17.64]$$

当然, 这也只是一个渐近级数. 对拉盖尔多项式的情况 $-\alpha=k=0$, 1, 2, …又得到 $F_1=0$.

用渐近公式

$$F(\alpha,\gamma,x)=F_1+F_2=\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}(-x)^{-\alpha}+\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}e^x x^{\alpha-\gamma}+\cdots, \qquad [17.65]$$

并用

$$\gamma=m+1, \quad -\alpha=k, \qquad [17.66]$$

我们就可以写出平面谐振子的解[17.27],

$$v_{k,m}=x^{\frac{m}{2}}e^{-\frac{x}{2}}F(-k,m+1,x). \qquad [17.67]$$

---

① 关于这个论题更详细的资料, 参看, 例如 E. T. Whittaker 和 G. N. Waston, *A Course of Modern Analysis* (Cambridge University Press, New York, 1920).

对于大的 x,

$$v_{k,m} \cong e^{+i\pi k}\frac{m!}{\Gamma(m+1+k)}x^{m/2+k}e^{-x/2}$$

$$+\frac{m!}{\Gamma(-k)}x^{-(m/2+k+1)}e^{+x/2}. \qquad [17.68]$$

在解[17.67]中, x 是实量(参看[17.15]); 由此得到[17.68] 式中第二项对大 x 是发散的. 由于这种原因, 物理上可能的解(即, 正交的和可归一化的)中唯一容许的本征值是 $k=0, 1, 2, \cdots$. 于是平面谐振子的渐近解是

$$v_{k,m} \cong e^{+i\pi k}\frac{m!}{\Gamma(m+1+k)}x^{m/2+k}e^{-x/2}. \qquad [17.69]$$

§18. 氢原子

a. 球坐标波动方程的分离变量

现在我们考虑具有势 $V(r)$ 的有心力场的薛定谔方程

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2 u + V(r)\cdot u = E\cdot u, \qquad [18.1]$$

用球坐标 r, ϑ, φ 写出, 用众所周知的公式

$$\left.\begin{aligned} x &= r\sin\vartheta\cos\varphi \\ y &= r\sin\vartheta\cos\varphi \\ z &= r\cos\vartheta \end{aligned}\right\}, \qquad [18.2]$$

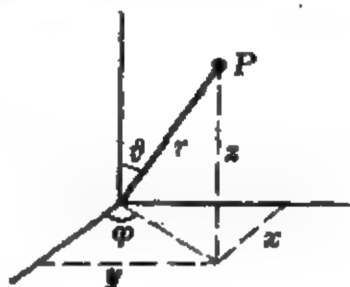


图 18.1

把它们和笛卡儿坐标 x, y, z(图 18.1)联系起来. 那么, 拉普拉斯算符取如下形式

$$\nabla^2 u = \frac{1}{r}\frac{\partial^2(ru)}{\partial r^2}$$

$$+\frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial u}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}\right\} \qquad [18.3]$$

或

$$\nabla^2 u=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\{\cdots\}.$$

假设取

$$u=v(r)\cdot Y(\vartheta,\varphi) \tag{18.4}$$

的形式. 方程式[18.1]分离为径向部分和与角有关的部分:

$$\frac{1}{v}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\{E-V(r)\}$$

$$=-\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right\}. \tag{18.5}$$

因为这个方程式的左端仅和 r 有关,而右端却仅与 ϑ 和 φ 有关,所以可以使两边等于常数 λ 并且分离成:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r}\right)+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]-\frac{\lambda}{r^2}\right\}v=0, \tag{18.6}$$

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+\lambda Y=0. \tag{18.7}$$

方程式[18.7]唯一物理上有用的解是

$$\lambda=l(l+1),\quad l=0,1,2,\cdots; \tag{18.8}$$

它们是**球谐函数** $Y_l(\vartheta,\varphi)$. 这里我们只写出这些函数的最重要的性质,而准备在练习(参看 § 43)中更详细地涉及它们.

b. 球谐函数

我们现在用条件[18.8]写出和角有关的微分方程为

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial Y}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}+l(l+1)Y=0. \tag{18.9}$$

这个方程是根据有心力场的要求而得到的;然而, 它是和势 $V(r)$ 的具体形式无关的. 我们用试解

$$Y(\vartheta,\varphi)=\Theta(\vartheta)e^{im\varphi} \tag{18.10}$$

求解这个方程,其中单值性的要求导致 m 是整数值. 这样,我们得到微分方程

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\vartheta}\right)+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{\sin^2\vartheta}\right\}\theta=0. \quad [18.11]$$

用代换

$$\left.\begin{aligned} x&=\cos\vartheta \\ \theta(\vartheta)&=y(x) \end{aligned}\right\},\text{由此}$$

$$\left.\begin{aligned} \sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta&=-\mathrm{d}x \\ \sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\vartheta}&=-(1-x^2)y' \end{aligned}\right\}, \quad [18.12]$$

方程式变换为

$$(1-x^2)y''-2xy'+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right\}y=0. \quad [18.13]$$

这个方程式的解可以写成如下形式

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{1}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}(x^2-1)^l, \quad [18.14]$$

其中整数m必须满足的条件是

$$-l\leqslant m\leqslant +l. \quad [18.15]$$

把公式这样归一化，使得

$$P_l^0(1)=1. \quad [18.16]$$

把公式[18.14]应用到正的以及负的m去，我们得到

$$P_l^m=c_{lm}P_l^{-m}, \qquad c_{lm}=(-1)^m\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \quad [18.17]$$

关系．所以，原始的微分方程[18.9]的解是

$$Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)=P_l^m(\cos\vartheta)e^{im\varphi}. \quad [18.18]$$

函数$Y_{l,m}$(或单独P_l^m)称为田形谐函数或球谐函数，它们的实部和虚部的节线把球面分成不同号的、为纬圈和子午圈所分开的四边形(田形)区域．函数$Y_{l,0}=P_l^0$，简写作Y_l和P_l，称为带谐函数，因为它们用其节线把球划分为不同号的纬带．由于归一化[18.16]式，$P_l(x)$是勒让德多项式：

$$P_0=1,\quad P_1=x,\quad P_2=\frac{3}{2}x^2-\frac{1}{2},\quad P_3=\frac{5}{2}x^3-\frac{3}{2}x,$$

$$P_4=\frac{35}{8}x^4-\frac{15}{4}x^2+\frac{3}{8},\cdots.$$

球谐函数 $Y_l(\vartheta,\varphi)$ 是 $1/r^l$ 乘以 x，y，z 的 l 次多项式，它满足拉普拉斯方程：

$$Y_l(\vartheta,\varphi)=\frac{H_l(x,y,z)}{r^l},\nabla^2 H_l=0.\qquad [18.19]$$

$Y_l(\vartheta,\varphi)$能用线性无关且正交的函数 $Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$展开：

$$Y_l(\vartheta,\varphi)=\sum_{m=-l}^{+l}b_m Y_{l,m}(\vartheta,\varphi).\qquad [18.20]$$

归一化积分的值是

$$N_l^m=\int_{-1}^{+1}\{P_l^m(x)\}^2\mathrm{d}x=\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\cdot\frac{2}{2l+1}.\qquad [18.21]$$

用这个值我们得到归一化的球谐函数

$$\bar{Y}_{l,m}(\vartheta,\varphi)=\frac{P_l^m(\cos\vartheta)}{\sqrt{N_l^m}}\cdot\frac{\exp[im\varphi]}{\sqrt{2\pi}}.\qquad [18.22]$$

c. 径向微分方程的解

由于条件[18.8]，方程式[18.6]变为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rv)+\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E-V(r)-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right\}rv=0.\qquad [18.23]$$

本征函数 v 满足正交性关系

$$\int_0^{\infty}v_{E'}^{*}v_E r^2\mathrm{d}r=0\qquad 对\quad E'\neq E,l'=l.$$

从微分方程看出，对于在有心力场的径向运动，形式上存在一个附加势

$$l(l+1)\hbar^2/2mr^2.$$

如果设

$$P^2 = l(l+1)\hbar^2,$$

则这个表达式是类似于经典离心力的势，

$$\bar{V}(r) = \frac{P^2}{2mr^2}. \qquad (P = \text{角动量})$$

这给出粒子的量子数 l 和角动量 $|P|$ 间的一个重要关系.

为了求解径向微分方程[18.23]，必须明显地给出势 $V(x)$. 我们选取库仑势为例：

$$V(r) = \frac{e_1 e_2}{r}, \qquad [18.24]$$

其中 $e_1 = +Ze$　　(Z = 原子序数),

$e_2 = -e$　　(e = 基本电荷的量值),

并得到

$$\frac{d^2}{dr^2}(rv) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)(rv) - \frac{l(l+1)}{r^2}(rv) = 0. \quad [18.25]$$

我们的目的是用波动力学描述由一个电子加上原子核构成的系统. 为此，我们应该用与两个粒子的六个坐标 x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2 对应的薛定谔方程. 因为势仅和相对坐标有关，$V = V(x_1 - x_2, y_1 - y_2, z_1 - z_2)$，这一薛定谔方程(类似于经典力学)能分离成一个描述质心运动的方程，加上一个确定两个粒子相对运动的方程式. 后一个方程在形式上和质量为 m 的粒子在势 V 中运动的运动方程一样，其中 m 是折合质量，

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_{电子}} + \frac{1}{m_{核}}. \qquad [18.26]$$

把折合质量 m (在这种情况下，它实际上等于 $m_{电子}$) 代入[18.25]式并求解这个方程式，便能确定电子和核作相对运动时的能量本征值和本征函数.

为此目的，我们引进无量纲的量 ρ 和 ε：

$$r=\rho a_0, \qquad E=\varepsilon E_0, \qquad [18.27]$$

$$\left.\begin{aligned} a_0&=\frac{h^2}{Ze^2m} \qquad \text{(玻尔半径)} \\ E_0&=\frac{Z^2e^4m}{2h^2}=\frac{h^2}{2ma_0^2}\text{(对应于 } a_0 \text{ 的能量)} \end{aligned}\right\}. \qquad [18.28]$$

用这些量我们得到

$$\frac{d^2}{d\rho^2}(\rho v)+\left(\varepsilon+\frac{2}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\rho v=0. \qquad [18.29]$$

对于小的 ρ，我们可以立即验证这些解

$$v\sim\rho^l, \qquad v\sim\rho^{-l-1}; \qquad [18.30]$$

对于大的 ρ，舍弃 $1/\rho$ 和 $1/\rho^2$ 阶各项，得到

$$v\sim\frac{\exp[\pm\rho\sqrt{-\varepsilon}]}{\rho}. \qquad [18.31]$$

求解微分方程[18.29]的一种方法是用幂级数作为试解；然而，我们想利用我们的超几何函数的知识。考虑到部分解 [18.30] 和 [18.31]式，我们令

$$v=\rho^l\exp[\pm\rho\sqrt{-\varepsilon}]\cdot\omega(\rho) \qquad [18.32]$$

作为试解，其中对于 $\rho\to0$，$\omega(\rho)$应该保持有限。如果我们把 ω 的微分方程（先用 -4ε 除）

$$\frac{d^2\omega}{d\rho^2}+\left(\pm2\sqrt{-\varepsilon}+\frac{2(l+1)}{\rho}\right)\frac{d\omega}{d\rho}$$
$$+\frac{2\pm2(l+1)\sqrt{-\varepsilon}}{\rho}\omega=0, \qquad [18.33]$$

和超几何函数 $F(\alpha,\gamma,x)$的方程式（参看[17.51]）

$$\frac{d^2F}{dx^2}+\left(\frac{\gamma}{x}-1\right)\frac{dF}{dx}-\frac{\alpha}{x}F=0 \qquad [18.34]$$

比较，如果令

$$\alpha=\pm\frac{1}{\sqrt{-\varepsilon}}+l+1, \qquad [18.35]$$

$$\gamma=2(l+1), \qquad [18.36]$$

$$x=\mp 2\rho\sqrt{-\varepsilon}; \qquad [18.37]$$

我们看出它们是完全相同的．这样，ω 由

$$\omega=\text{常数}\times F\left(\pm\frac{1}{\sqrt{-\varepsilon}}+l+1,\ 2(l+1),\ \mp 2\rho\sqrt{-\varepsilon}\right). \qquad [18.38]$$

给出．如在[18.30]式中我们猜想的那样，由幂级数展开式[17.54]

$$F(\alpha,\gamma,x)=1+\frac{\alpha}{\gamma}x+\cdots,$$

得知(对于小的 ρ)解[18.32]的确是从 ρ^l 开始的．

为了进一步讨论，我们必须把 $\varepsilon<0$ 和 $\varepsilon>0$，即$\sqrt{-\varepsilon}$是实数和虚数两种情况区别开来．

d．第一种情况：$\varepsilon<0$．分立能谱

我们始终取$\pm\sqrt{-\varepsilon}$的下端的符号；这意味着在[18.32]式中取负号．上端的符号不能导致物理上可能接受的解，因为归一化积分是发散的．

用[18.35]，[18.36]，[18.37]式，和径量子数 n_r，

$$n_r=-\alpha=\frac{1}{\sqrt{-\varepsilon}}-l-1, \qquad [18.39]$$

那么，对于大的 ρ，我们可以把 $F(\alpha,\gamma,x)$的渐近公式[17.65]写成

$$F\sim\Gamma(2l+2)\left\{\frac{1}{\Gamma\left[(1/\sqrt{-\varepsilon})+l+1\right]}(-2\rho\sqrt{-\varepsilon})^{n_r}+\frac{1}{\Gamma(-n_r)}\exp\left[2\rho\sqrt{-\varepsilon}\right](+2\rho\sqrt{-\varepsilon})^{-(1/\sqrt{-\varepsilon})-l-1}\right\}. \qquad [18.40]$$

由于第二项，对于 $\rho\to\infty$ 这个解是指数地趋于无限大；这种行为是和问题的物理过程不相容的．我们必须要求这项等于零．这意味着必须要求

$$n_r=0, 1, 2, \cdots. \qquad [18.41]$$

于是我们得到解[18.32]的渐近表达式

$$v\sim\exp[-\rho\sqrt{-\varepsilon}]\cdot\rho^{(1/\sqrt{-\varepsilon})-1} \qquad [18.42]$$

按照公式[17.57]，条件[18.41]使得超几何函数 $F(\alpha, \gamma, x)$ 变为较简单的缔合拉盖尔多项式，

$$L_{m+k}^{m}=\text{常数}\times F(-k, m+1, x). \qquad [18.43]$$

所以，按照试解[18.32]，径向微分方程[18.29]的本征函数是

$$v=\text{常数}\times\rho^{l}\exp\left[-\frac{\rho}{n_r+l+1}\right]L_{2l+1+n_r}^{2l+1}\left(\frac{2}{n_r+l+1}\rho\right).$$

可以用类似于平面谐振子的本征函数的归一化方法进行归一化．

1. **量子数．能量的本征值和简并度．**用

$$n=\frac{1}{\sqrt{-\varepsilon}}=n_r+l+1. \qquad [18.44]$$

定义**主量子数** n．它的值由条件[18.41]确定：

$$n=l+1, l+2, \cdots. \qquad [18.45]$$

这些关系也意味着，对给定的 n，**角动量量子数** l 只能取如下的值

$$l=0, 1, \cdots, n-1. \qquad [18.46]$$

从[18.44]和[18.28]式得到能量的本征值：

$$E_n=\varepsilon E_0=-\frac{1}{n^2}\ \frac{Z^2e^4m}{2h^2}. \qquad [18.47]$$

用这些结果我们可以写出著名的巴耳末公式：

$$hv=E'-E'', \text{或}\ \ v=R\left(\frac{1}{n''^2}-\frac{1}{n'^2}\right),\ \ R=\frac{Z^2e^4m}{2h^3}.$$

值得指出的是，本征值 E_n 和角动量量子数 l 完全无关．对一个固定的 l，我们已经看到，存在 $2l+1$ 个不同的球谐函数，或薛定谔方程

[18.1]的本征函数. 对于在一个完全任意的有心力场$V(r)$中出现的$(2l+1)$重简并度，必须增添和库仑场有关的n重简并度[18.46]. 这样，我们得到一个具有主量子数n的态的全部简并度g_n，

$$g_n=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=\sum_{l=0}^{n-1}\{(l+1)^2-l^2\}=n^2. \quad [18.48]$$

在以前已求解的各种情况中，无论在哪种情况我们都未发现过这简并度.

我们注意，基态$(n=1, l=0)$是非简并的. 此外，因为$\varepsilon=-1$，在这种情况下，解变为

$$u=常数\times e^{-\rho}. \quad [18.49]$$

2. 消除简并的例子. 一个碱金属原子的价电子在有心力场中运动，然而这有心力场和库仑场不完全一样. 结果消除了库仑场引起的n重简并，并且价电子的第n个类氢能级分裂为n个能级. 如果存在外磁场，我们得到另一个例子. 磁场完全改变了原来有心力场的特性，结果第n个能级分裂成n^2个能级.

e. 第二种情况：$\varepsilon>0$. 连续能谱

我们来描述"自由"粒子的情况. 用[18.38]式和下面假设

$$\sqrt{-\varepsilon}=+i\sqrt{\varepsilon} \qquad (正根!), \quad [18.50]$$

我们可以把解[18.32]写成

$$v(\rho)=常数\times\rho^l\exp[-i\sqrt{\varepsilon}\,\rho]F\left(\frac{i}{\sqrt{\varepsilon}}+l+1, 2l+2, 2i\rho\sqrt{\varepsilon}\right), \quad [18.51]$$

其中我们再次限定用$\pm\sqrt{\varepsilon}$的下端的符号，引进自由粒子的波数k，

$$kh=\sqrt{2mE}, \quad [18.52]$$

导致关系式(参看[18.27])

$$\left.\begin{aligned}ka_0=\sqrt{\varepsilon}=\sqrt{\frac{E}{E_0}}\\ \sqrt{\varepsilon}\,\rho=\frac{\sqrt{\varepsilon}}{a_0}r=kr\quad\left(a_0=\frac{h^2}{Ze^2m}\right)\end{aligned}\right\},\qquad [18.53]$$

因此可以把解[18.51]写成较清晰些的形式。

$$v(r)=\text{常数}\times(kr)^l e^{-ikr}F\left(\frac{i}{ka_0}+l+1,2l+2,2ikr\right).\qquad [18.54]$$

事实上，这个解实际上是实的．为证明这点，我们把F分为两部分

$$F=F_1+F_2,\qquad [18.55]$$

并对$F_{\frac{1}{2}}$用积分表示[17.59]

$$F_{\frac{1}{2}}=\frac{\Gamma(2l+2)}{2\pi i}\times\int_{\substack{C_1\\C_2}}e^t t^{(i/ka_0)-l-1}(t-2ikr)^{-(i/ka_0)-l-1}\mathrm{d}t,$$

$$[18.56]$$

例如，如果在F_2的表达式中用代换

$$t\to t'-2ikr\qquad [18.57]$$

那么，积分路径C_2和C_1相同，由此立即得到

$$e^{-ikr}F_2=(e^{-ikr}F_1)^*.\qquad [18.58]$$

这样，我们可以写出

$$e^{ikr}F=e^{-ikr}F_1+(e^{-ikr}F_1)^*,$$

这便证明了上述的断言．

现在，我们要研究解[18.54]的渐近行为．用[18.58]式，F_1的渐近公式[17.64]式，以及[18.35]到[18.37]式和[18.53]式等关系，大r的解可以写成

$$\begin{aligned}v(r)&=\text{常数}\times(kr)^l e^{-ikr}F\sim\text{常数}\\&\times\frac{\Gamma(2l+2)}{\Gamma[(i/ka_0)+l+1]}(kr)^l e^{+ikr}(2ikr)^{(i/ka_0)-l-1}\\&+\text{复数共轭}.\end{aligned}\qquad [18.59]$$

用

$$2ikr=\exp\left[\ln(2kr)+i\frac{\pi}{2}\right]$$

和

$$(2ikr)^{(i/ka_0)-l-1}=2^{-l-1}(kr)^{-l-1}\exp\left[\frac{i}{ka_0}\ln(2kr)\right]$$
$$\times\exp\left[+i\frac{\pi}{2}\left(\frac{i}{ka_0}-l-1\right)\right],$$

我们也可以把这个表达式写成

$$v(r)=\text{常数}\times\frac{(2l+1)!}{\Gamma[(i/ka_0)-l+1]}$$
$$\times\frac{1}{kr}\exp\left[ikr+\frac{i}{ka_0}\ln(2kr)-i\frac{\pi}{2}(l+1)\right]$$
$$\times\frac{1}{2^{l+1}}\exp\left[-\frac{\pi}{2ka_0}\right]+\text{复数共轭}. \qquad [18.60]$$

用Γ函数的关系

$$\Gamma\left(\frac{i}{ka_0}+l+1\right)=|\Gamma|\exp[i\sigma(l,ka_0)] \qquad [18.61]$$

(其中σ是Γ函数的相), 最后, 对于$kr\gg1$, 我们得到

$$v_l(r)=\text{常数}\times\frac{(2l+1)!}{2^l}\frac{\exp[-\pi/2ka_0]}{|\Gamma[(i/ka_0)+l+1]|}\frac{1}{kr}$$
$$\times\cos\left\{kr+\frac{1}{ka_0}\ln(2kr)-\frac{\pi}{2}(l+1)-\sigma(l,ka_0)\right\}. \ [18.62]$$

实质上, 这给出一个球面波的解, 然而, 它包含位相的一个对数修正项. 修正项的作用是使波函数在大r处的位相比kr变化得更快. 这种库仑场的典型性的修正在经典理论上也能证明是正确的.

对于$Z=0$, 即对于$1/a_0=0$(参看[18.28]), 由[18.62]式(也参看[21.10])得到自由粒子的解.

我们将在练习(参看§46)中证明, 按照

$$\int_0^\infty v_{l,k}v_{l,k'}r^2\mathrm{d}r=\delta(k'-k) \qquad [18.63]$$

的归一化便导致归一化渐近公式

$$v_{l,k}(r)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{r}$$

$$\times\sin\left\{kr+\frac{1}{ka_0}\ln(2kr)-\frac{\pi}{2}l-\sigma(l,ka_0)\right\}. \qquad [18.64]$$

注：从上面的公式很明显地看出，正能态($\varepsilon>0$)是无限地简并的．这是因为对于 k 的一个给定值，量子数 l 能独立地取从 0 到∞间的一切值．

f. 波动方程在抛物线坐标中的解

氢原子的波动方程也可以在抛物线坐标中分离和求解①．我们要求这个解，并证明(正如在物理基础上所预期那样)将得到和球坐标中同样的能量本征值和同样的简并度．此外，我们也将用这个解来处理散射问题，并且推导出对应于公式[18.62]而特征更明显的解来．

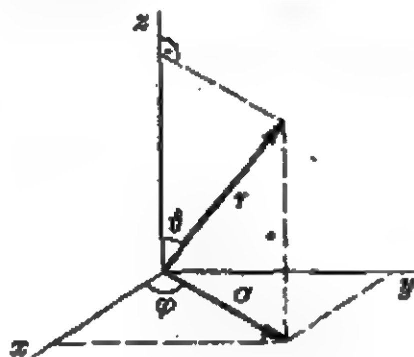


图 18.2

抛物线坐标 $\lambda_1, \lambda_2, \varphi$ 和球极坐标(图 18.2)的联系由下式给出

$$\left.\begin{aligned}\lambda_1&=r+z=r(1+\cos\theta)\\ \lambda_2&=r-z=r(1-\cos\theta)\\ \varphi&=\varphi\end{aligned}\right\}. \qquad [18.65]$$

另外，我们有

$$\left.\begin{aligned}r&=\frac{1}{2}(\lambda_1+\lambda_2)\\ z&=\frac{1}{2}(\lambda_1-\lambda_2)\\ \sigma^2&=r^2-z^2=\lambda_1\lambda_2\end{aligned}\right\}. \qquad [18.66]$$

---

① 参看．A. 索末菲："论电子的衍射和制动"("Über die Beugung und Bremsung von Elektronen," *Ann. Physik* 11, 268(1931).

这时用[18.27]式给出的无量纲坐标 $\varepsilon=E/E_0$ 和 $\rho=r/a_0$，我们立即写出具有库仑势[18.24]的波动方程[18.1]：

$$\nabla_u^2+\left(\varepsilon+\frac{2}{\rho}\right)u=0. \qquad [18.67]$$

下面，直至论述连续谱为止，我们还是用无量纲的抛物线坐标．作代换 $r\to r/a_0$，$Z\to Z/a_0$，由公式[18.65]和[18.66]得到这些结果．为简单起见，我们也称这些无量纲量为 λ_1 和 λ_2．

g．波动方程[18.67]在抛物线坐标中的分离

在这种情况下，长度元的平方是（无量纲量！）

$$\begin{aligned}\mathrm{d}s^2&=\mathrm{d}\sigma^2+\mathrm{d}z^2+\sigma^2\mathrm{d}\varphi^2\\&=\frac{1}{4\lambda_1\lambda_2}(\lambda_1\mathrm{d}\lambda_2+\lambda_2\mathrm{d}\lambda_1)^2+\frac{1}{4}(\mathrm{d}\lambda_1-\mathrm{d}\lambda_2)^2+\lambda_1\lambda_2\mathrm{d}\varphi^2\\&=\frac{\lambda_1+\lambda_2}{4}\left\{\frac{\mathrm{d}\lambda_1^2}{\lambda_1}+\frac{\mathrm{d}\lambda_2^2}{\lambda_2}+4\left(\frac{1}{\lambda_1}+\frac{1}{\lambda_2}\right)^{-1}\mathrm{d}\varphi^2\right\}.\end{aligned} \qquad [18.68]$$

实际上对于正交坐标，不存在混合项．可以证明①，在正交曲线坐标 x_1,x_2,x_3 中的拉普拉斯算符的普遍形式是

$$\begin{aligned}\nabla^2u=&\frac{1}{e_1e_2e_3}\frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{e_2e_3}{e_1}\frac{\partial u}{\partial x_1}\right)+\frac{1}{e_1e_2e_3}\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\frac{e_3e_1}{e_2}\frac{\partial u}{\partial x_2}\right)\\&+\frac{1}{e_1e_2e_3}\frac{\partial}{\partial x_3}\left(\frac{e_1e_2}{e_3}\frac{\partial u}{\partial x_3}\right),\end{aligned} \qquad [18.69]$$

并有

$$\mathrm{d}s^2=\sum_{k=1}^{3}e_k^2\mathrm{d}x_k^2,\quad \mathrm{d}V=e_1e_2e_3\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3. \qquad [18.70]$$

在我们的情况下，这导致

$$\begin{aligned}\nabla^2u=\frac{4}{\lambda_1+\lambda_2}&\left\{\frac{\partial}{\partial\lambda_1}\left(\lambda_1\frac{\partial u}{\partial\lambda_1}\right)+\frac{\partial}{\partial\lambda_2}\left(\lambda_2\frac{\partial u}{\partial\lambda_2}\right)\right.\\&\left.+\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\lambda_1}+\frac{1}{\lambda_2}\right)\frac{\partial^2u}{\partial\varphi^2}\right\}.\end{aligned} \qquad [18.71]$$

---

① 参看：W. 泡利，物理学讲义：电动力学(M. I. T. Press, Cambridge, Mass., 1972).

用这一结果，我们可以把抛物线坐标中的波动方程[18.67]写成

$$\frac{\partial}{\partial\lambda_1}\left(\lambda_1\frac{\partial u}{\partial\lambda_1}\right)+\frac{\partial}{\partial\lambda_2}\left(\lambda_2\frac{\partial u}{\partial\lambda_2}\right)+\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\lambda_1}+\frac{1}{\lambda_2}\right)\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}$$

$$+\left\{\frac{\varepsilon}{4}(\lambda_1+\lambda_2)+1\right\}u=0. \qquad [18.72]$$

用试解

$$u=f_1(\lambda_1)\cdot f_2(\lambda_2)\cdot e^{\pm im\varphi}, \qquad [18.73]$$

可以把这方程式分离；结果是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda_1}\left(\lambda_1\frac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}\lambda_1}\right)+\left(-\frac{1}{4}\frac{m^2}{\lambda_1}+\frac{\varepsilon}{4}\lambda_1+\frac{1+\beta}{2}\right)f_1=0, \qquad [18.74]$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda_2}\left(\lambda_2\frac{\mathrm{d}f_2}{\mathrm{d}\lambda_2}\right)+\left(-\frac{1}{4}\frac{m^2}{\lambda_2}+\frac{\varepsilon}{4}\lambda_2+\frac{1-\beta}{2}\right)f_2=0, \qquad [18.75]$$

其中参数 β 是任意分离常数．这两个方程式具有平面谐振子[17.16]式的形式，现在把它写成

$$(xf')'+\left\{-\frac{x}{4}-\left(n_i+\frac{m+1}{2}\right)-\frac{m^2}{4x}\right\}f=0,\ i=1,2, \qquad [18.76]$$

$(\lambda/4\to n_i+(m+1)/2,\ k\to n_i.$ ）我们求得

$$f=\text{常数}\times x^{m/2}e^{-x/2}L^m_{m+n_i}(x)$$

$$=\text{常数}\times x^{m/2}e^{-x/2}F(-n_i, m+1, x) \qquad [18.77]$$

是这个方程式唯一有用的解(参看[17.27]式)．数 n_1, n_2 和 m 是对应于抛物线坐标 λ_1, λ_2 和 φ 的量子数．

h.　分立能谱 ($\varepsilon<0$)

令

$$x=\lambda_i\sqrt{-\varepsilon} \qquad (\sqrt{-\varepsilon}>0) \qquad [18.78]$$

并且这样选取 β，使得

$$\left.\begin{aligned}\frac{1}{2}(1+\beta)&=\sqrt{-\varepsilon}\left(n_1+\frac{m+1}{2}\right)\\ \frac{1}{2}(1-\beta)&=\sqrt{-\varepsilon}\left(n_2+\frac{m+1}{2}\right)(n_i=0,1,2,\cdots)\end{aligned}\right\}. \qquad [18.79]$$

可以使[18.76]式与[18.74]和[18.75]两式一致. 由此,立即得到

$$\lambda=\sqrt{-\varepsilon}(n_1+n_2+m+1). \qquad [18.80]$$

用 $$n=n_1+n_2+m+1 \qquad (n=1,2,\cdots) \qquad [18.81]$$

也可以写成

$$\varepsilon=-\frac{1}{n^2} \qquad [18.82]$$

的形式, 它对应于已得到的能量本征值的表达式[18.47]. 此外,我们得到

$$\beta=\sqrt{-\varepsilon}\,(n_1-n_2)=\frac{n_1-n_2}{n}. \qquad [18.83]$$

现在可以把解[18.73]详细写出($x\to\lambda_i/n$):

$$u=\text{常数}\times\exp\left[-\frac{\lambda_1+\lambda_2}{2n}\right]\left(\frac{\lambda_1\lambda_2}{n^2}\right)^{m/2}L^m_{m+n_1}\left(\frac{\lambda_1}{n}\right)$$

$$\times L^m_{m+n_2}\left(\frac{\lambda_2}{n}\right)e^{\pm im\varphi}. \qquad [18.84]$$

注: 当存在外场F时,抛物线坐标中的波动方程也是可能分离的,这时[18.1]式中的势V加上一项

$$\text{常数}\times(F\cdot z).$$

其唯一后果是, 已分离的方程式[18.74]和[18.75]分别得到附加项

$$+\text{常数}\times\lambda_1^2 f_1 F \qquad \text{和} \qquad -\text{常数}\times\lambda_2^2 f_2 F.$$

如果F是微小的,可以用玻恩近似法近似地求解这些方程式(参看§24). 一个有趣的结果是,在第一级近似中,能量本征值为

$$\varepsilon=-\frac{1}{n^2}+\text{常数}\times(n_1-n_2)nF.$$

(第一级斯塔克效应)①

① 参看,例如,A.索末菲,《原子结构和光谱线》第二卷(A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien*, vol. 2.)

i. 连续谱($\varepsilon>0$)

现在我们恢复通常的单位;即用 λ_i 代替 $a_0\lambda_i'$(其中 λ_i' 为无量纲的量). 象[18.52]式,我们引进波数 k,并借助于[18.53]式,

$$\sqrt{-\varepsilon}=\mp i\sqrt{\varepsilon}=\mp ika_0 \qquad [18.85]$$

(对于指标 1,用上端的符号),把条件[18.79]写成

$$\left.\begin{aligned}\frac{1}{2}(1+\beta)&=-ika_0\left(v_1+\frac{m+1}{2}\right)\\ \frac{1}{2}(1-\beta)&=ika_0\left(v_2+\frac{m+1}{2}\right)\end{aligned}\right\}. \qquad [18.86]$$

两式相加得出

$$v_1-v_2=\frac{i}{ka_0}, \qquad [18.87]$$

其中(和 n_i 不同)v_i 不是整数. 用这种记号,微分方程[18.72] 为

$$\frac{\partial}{\partial\lambda_1}\left(\lambda_1\frac{\partial u}{\partial\lambda_1}\right)+\frac{\partial}{\partial\lambda_2}\left(\lambda_2\frac{\partial u}{\partial\lambda_2}\right)-\frac{m^2}{4}\left(\frac{1}{\lambda_1}+\frac{1}{\lambda_2}\right)u$$
$$+\left\{\frac{k^2}{4}(\lambda_1+\lambda_2)+\frac{1}{a_0}\right\}u=0, \qquad [18.88]$$

并且它的解是($x\to\mp ik\lambda_i$)

$$u=\text{常数}\times\exp\left[ik\frac{\lambda_1-\lambda_2}{2}\right](k^2\lambda_1\lambda_2)^{m/2}F(\alpha, m+1, -ik\lambda_1)$$
$$\times F\left(\alpha+\frac{i}{ka_0}, m-1, ik\lambda_2\right)e^{\pm im\varphi}. \qquad [18.89]$$

在这公式中,我们已用$-\alpha$ 代替尚未确定的 v_1.

注: 我们的所有公式和表达式都是对正 a_0 写出的. 就是说,对吸引力来说的. 在斥力的情况下,(只有 $\varepsilon>0$ 才有意义)必须作$a_0\to-a_0$ 代换.

第六章 碰撞过程

这里我们涉及不考虑自旋相互作用的粒子被粒子的散射. 由上一章连续能谱($\varepsilon>0$)情况中得到的公式便得出这问题的解了.

现在考虑的出发点是解[18.89]. 用沿正 z 方向传播的平面波代表入射粒子流; 当然, 波是对称于 z 轴的, 所以我们能局限于 $m=0$ 的情况. 对 $\alpha=0$ 的特殊情况, 我们将证明, 解[18.89]

$$u=\text{常数}\times\exp\left[\frac{ik}{2}(\lambda_1-\lambda_2)\right]F\left(\frac{i}{ka_0},1,ik\lambda_2\right), \qquad [I]$$

可以渐近地写成入射平面波加上散射波. 对于 $\alpha\neq0$ 的一般情况, 这个解包含沿负 z 方向传播的平面波和入射球面波; 这由超几何函数 F 的渐近公式[17.65]立即得到. 因此, 如前所述这种情况是和物理问题不相容的.

注: 在相对论性的情况下, 分离抛物线坐标的波动方程是不可能的. 特别是, 渐近解的这种简单分解法也是无效的.

§19. 散射问题的渐近解

超几何函数 $F(i/ka_0, 1, ik\lambda_2)$ 的渐近公式[17.65]是

$$F=\frac{1}{\Gamma(1-i/ka_0)}(-ik\lambda_2)^{-i/ka_0}\left\{1+\frac{1}{ik\lambda_2(ka_0)^2}\right\}$$

$$+\frac{1}{\Gamma(i/ka_0)}\exp[ik\lambda_2](ik\lambda_2)^{-1+i/ka_0}; \qquad [19.1]$$

在这表达式中, 我们已用到[17.62]式给出的第一级近似. 用[18.65]和[18.66]式, 我们再次引进球面坐标 r 和 θ:

$$\left.\begin{aligned}\lambda_1&=r+z\\ \lambda_2&=r-z=r(1-\cos\vartheta)=2r\sin^2\frac{1}{2}\vartheta\\ \lambda_1-\lambda_2&=2z\end{aligned}\right\}. \qquad [19.2]$$

如果详细地写出，则解[I]为

$$u=c\frac{\exp[-\pi/2ka_0]}{\Gamma(1-i/ka_0)}\left\{\exp\left[i\left(kz-\frac{1}{ka_0}\ln\left(2kr\sin^2\frac{1}{2}\vartheta\right)\right)\right]\right.$$

$$\times\left(1-\frac{i}{2kr(ka_0)^2\sin^2\frac{1}{2}\vartheta}\right)-i\frac{\Gamma(1-i/ka_0)}{\Gamma(i/ka_0)}$$

$$\left.\times\frac{\exp\left[i\left(kr+k^{-1}a_0^{-1}\ln\left(2kr\sin^2\frac{1}{2}\vartheta\right)\right)\right]}{2kr\sin^2\frac{1}{2}\vartheta}\right\}. \qquad [19.3]$$

求这个表达式时已用到

$$\left.\begin{aligned}(-i)^{-i/ka_0}&=\exp\left[-\frac{\pi}{2ka_0}\right]\\ (k\lambda_2)^{-i/ka_0}&=\exp\left[-\frac{i}{ka_0}\ln\left(2kr\sin^2\vartheta/2\right)\right]\end{aligned}\right\}. \qquad [19.4]$$

为了进一步简化这表达式，我们使用公式

$$\frac{\Gamma(1-i/ka_0)}{i\Gamma(i/ka_0)}=\frac{1}{ka_0}\frac{\Gamma(1-i/ka_0)}{\Gamma(1+i/ka_0)}$$

$$=\frac{1}{ka_0}\exp[-2i\sigma(0,ka_0)], \qquad [19.5]$$

从函数方程

$$\Gamma\left(1+\frac{i}{ka_0}\right)=\frac{i}{ka_0}\Gamma\left(\frac{i}{ka_0}\right) \qquad [19.6]$$

和[18.61]中$\sigma(l,ka_0)$的定义直截了当地得到它．用归一化

$$c\cdot\frac{\exp[-\pi/2ka_0]}{\Gamma(1-i/ka_0)}=1, \qquad [19.7]$$

渐近解[19.3]就可以写成

$$u=\exp\left[i\left(kz-\frac{1}{ka_0}\ln\left(2kr\sin^2\frac{1}{2}\vartheta\right)\right)\right]\left(1-\frac{i}{2k^3a_0^2r\sin^2\frac{1}{2}\vartheta}\right)$$

$$+\frac{\exp\left\{i\left[kr+k^{-1}a_0^{-1}\ln\left(2kr\sin^2\frac{1}{2}\vartheta\right)-2\sigma(0,ka_0)\right]\right\}}{2k^2a_0r\sin^2\frac{1}{2}\vartheta}\quad[19.8]$$

的形式．按照假设，这公式只对

$$k\lambda_z=2kr\sin^2\frac{1}{2}\vartheta\gg1\quad[19.9]$$

有效．就是说，除了由[19.9]式定义的抛物线区域(图 19.1)外，在全部空间都有效．

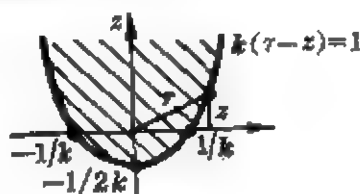


图 19.1

解[19.8]的最低阶近似为

$$u\sim\exp[ikz]+f(\vartheta)\frac{\exp[ikr]}{r}\quad[19.10]$$

的形式；就是说，$u\sim$入射平面波＋出射球面波．在迄今已用它计算过的库仑场情况下，对位相必须作下列代换：

$$\left.\begin{aligned}kz&\to kz-\frac{1}{ka_0}\ln\left(2kr\sin^2\frac{1}{2}\vartheta\right)\\kr&\to kr+\frac{1}{ka_0}\ln\left(2kr\sin^2\frac{1}{2}\vartheta\right)\end{aligned}\right\}.\quad[19.11]$$

若势更快地衰减

$$\lim_{r\to\infty}V(r)\cdot r=0,$$

则这个对数位相修正不会出现．在一个练习中(参看§46)我们将指出，对这样一种势，属于 l 的一个确定值的波函数的另一渐近表示可能是

$$u\sim\frac{\text{常数}}{r}\times\sin\left(kr-l\frac{\pi}{2}+\delta_l\right).\quad[19.12]$$

在公式[18.64]中，我们已导出库仑势的类似渐近表达式，而它是

用代换[19.11]从[19.12]式求得的.

§ 20. 散射截面. 卢瑟福散射公式

用[19.8]和[19.10]式给出的解，我们能计算微分散射截面 dQ. dQ 的定义是

$$dQ=\frac{i_s}{i_0}=\frac{(\text{单位时间散射进立体角 } d\Omega \text{内的粒子数})}{(\text{单位时间单位面积上的入射粒子数})}. \qquad [20.1]$$

如果散射问题的解是[19.10]式的形式，那么我们有

$$dQ=|f(\vartheta)|^2 d\Omega. \qquad [20.2]$$

我们通过计算散射粒子流和入射粒子流之比来证明这个公式. 从粒子流密度的普遍公式[7.10]

$$i=\frac{h}{2mi}(\psi^*\operatorname{grad}\psi-\psi\operatorname{grad}\psi^*),$$

对(入射)平面波我们得到

$$i_0=\frac{hk}{m}; \qquad [20.3]$$

对散射进立体角 $d\Omega$ 内的波，我们立即得到

$$i_s=\frac{hk}{mr^2}|f(\vartheta)|^2r^2d\Omega. \qquad [20.4]$$

$\left(\text{记着 } kr\gg1 \text{ 和 } \operatorname{grad}\sim\frac{d}{dr}.\right)$这样，就证明了公式[20.2].

由[20.2]式我们得到[19.8]的解

$$dQ=\frac{1}{4k^4a_0^2\sin^4\frac{1}{2}\vartheta}d\Omega. \qquad [20.5]$$

由于

$$k^2a_0=\left(\frac{mv}{h}\right)^2a_0=\frac{2mE}{h^2}\cdot\frac{h^2}{Ze^2m}=\frac{2E}{Ze^2}, \qquad [20.6]$$

便得出著名的卢瑟福散射公式

$$dQ=\frac{Z^2e^4}{16E^2\sin^4\frac{1}{2}\vartheta}d\Omega=\frac{Z^2e^4}{4m^2v^4\sin^4\frac{1}{2}\vartheta}d\Omega. \qquad [20.7]$$

这表达式以及公式[19.8]也都可以从经典物理推导出来;① 它是特殊的库仑势的结果. 对于其他势, 一般说来经典的和波动力学②的结果是不可能相同的.

§21. 自由粒子波动方程的解

现在我们要尝试直接求解散射问题, 而不涉及普遍的渐近公式[17.65]. 从而我们将较好地理解这个问题. 朝着这个目标, 我们首先在球坐标中求解自由粒子的波动方程

$$\nabla^2u+k^2u=0. \qquad [21.1]$$

用通常的试解[18.4]

$$u=v_l(r)Y_l(\vartheta,\varphi),$$

我们把这个微分方程分离为一个和角有关的部分以及一个只和 r 有关的部分. 和 r 有关部分是(参看[18.6], $V=0$)

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rv_l)+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)v_l=0, \qquad [21.2]$$

或用无量纲坐标 $\rho=kr$ 写成

$$\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}(\rho v_l)+\left(1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)v_l=0. \qquad [21.3]$$

用归纳法($l\to l+1$)我们得到

$$v_{l+1}=-\rho^l\frac{d}{d\rho}(\rho^{-l}v_l)=-\frac{dv_l}{d\rho}+\frac{l}{\rho}v_l. \qquad [21.4]$$

于是, 我们可以把[21.3]式的解写成

$$v_l=\rho^l(-1)^l\left(\frac{d}{\rho d\rho}\right)^l v_{l=0} \qquad [21.5]$$

① W. Gordon, *Z. Physik* 48, 188(1928).

② Th. Sexl, *Z. Physik* 67, 766(1931).

的形式. 由[21.3]式我们立即得到 $v_{l=0}$ 的两个独立解:

$$\left.\begin{aligned}\xi_0^{(1)} &= \frac{\exp[i\rho]}{i\rho} \quad \text{出射球面波}\\ \xi_0^{(2)} &= -\frac{\exp[-i\rho]}{i\rho} \text{入射球面波}\end{aligned}\right\}. \qquad [21.6]$$

由此, 例如, 我们得到解

$$\psi_0=\frac{1}{2}(\xi_0^{(1)}+\xi_0^{(2)})=\frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad [21.7]$$

它是在 $\rho=0$ 处唯一的正则解. 由于[21.5]式我们现在可以写出

$$\xi_l^{\binom{1}{2}}=\rho^l(-1)^l\left(\frac{\mathrm{d}}{\rho\mathrm{d}\rho}\right)^l\xi_0^{\binom{1}{2}}, \qquad [21.8]$$

$$\left.\begin{aligned}\psi_l&=\frac{1}{2}(\xi_l^{(1)}+\xi_l^{(2)})\\ &=\rho^l(-1)^l\left(\frac{\mathrm{d}}{\rho\mathrm{d}\rho}\right)^l\psi_0\\ \chi_l&=(\xi_l^{(1)}-\xi_l^{(2)})/2i\end{aligned}\right\}. \qquad [21.9]$$

我们现在要对两个特殊情况 $\rho\gg1$ 和 $\rho\ll1$ 写出稍为简单形式的解. 对于 $\rho\gg1$, 在[21.8]式中需要微分的只有 $e^{i\rho}$, 因为其他各项都是 $1/\rho$ 的高次项:

$$\begin{aligned}\xi_l^{(1)}&=(-1)^l(+i)^l\frac{\exp[i\rho]}{i\rho}=(-i)^l\frac{\exp[i\rho]}{i\rho}\\ &=\frac{\exp\{i[\rho-l(\pi/2)]\}}{i\rho}.\end{aligned}$$

于是我们立即得到

$$\psi_l=\frac{\sin(\rho-l\pi/2)}{\rho}. \qquad [21.10]$$

另一方面, 对于 $\rho\ll1$, 在[21.8]式中需要微分的只有 $1/\rho$. 结果是

$$\left.\begin{aligned}\psi_l &\sim \frac{\rho^l}{1\times3\times5\times\cdots\times(2l+1)}\\ \chi_l &\sim -\frac{1\times3\times5\times\cdots\times(2l-1)}{\rho^{l+1}}\end{aligned}\right\}. \qquad [21.11]$$

和柱函数的关系

解 $\xi_l^{\binom{(1)}{(2)}}$ 和 ψ_l 与柱函数存在下列关系：

$$\xi_l^{\binom{(1)}{(2)}}=\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}H_{l+\frac{1}{2}}^{\binom{(1)}{(2)}}(\rho), \qquad [21.12]$$

$$\psi_l=\sqrt{\frac{\pi}{2\rho}}I_{l+\frac{1}{2}}(\rho). \qquad [21.13]$$

函数 $H_{l+\frac{1}{2}}^{\binom{(1)}{(2)}}$ 是第一和第二类汉克尔函数，而 $I_{l+\frac{1}{2}}$ 是贝塞耳函数，众所周知，这些函数有下列积分表示(参看图 21.1)：

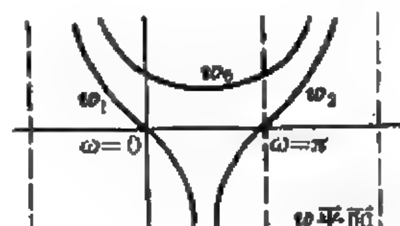


图 21.1

$$I_n(\rho)=\frac{1}{2\pi}\int_{\omega_0}\exp[i\rho\cos\omega]\exp\left[in\left(\omega-\frac{\pi}{2}\right)\right]d\omega,$$

$$H_n^{\binom{(1)}{(2)}}(\rho)=\frac{1}{2\pi}\int_{\binom{\omega_1}{\omega_2}}\exp[i\rho\cos\omega]\exp\left[in\left(\omega-\frac{\pi}{2}\right)\right]d\omega.$$

把[21.12]或[21.13]式代入[21.3]式，的确导致柱函数微分方程：

$$\frac{d^2Z_n}{d\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{dZ_n}{d\rho}+\left(1-\frac{n^2}{\rho^2}\right)Z_n=0. \qquad [21.14]$$

§ 22. 平面波按勒让德多项式的展开

我们要把平面波 e^{ikz} 按勒让德多项式展开($x\equiv\cos\theta$)：

$$e^{ikz}=\exp[ikr\cos\theta]=e^{i\rho x}=\sum_l f_l(\rho)P_l(x). \qquad [22.1]$$

系数 $f_l(\rho)$ 是待定的。为此我们需要积分表示

$$S_l=\frac{1}{l!}\left(\frac{\rho}{2}\right)^l\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}e^{i\rho x}(1-x^2)^l\mathrm{d}x=\psi_l(\rho), \qquad [22.2]$$

我们要通过推导类似于[21.4]式的递推公式来证明它. 我们有

$$S_0=\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}e^{i\rho x}\mathrm{d}x=\frac{e^{i\rho}-e^{-i\rho}}{2i\rho}=\frac{\sin\rho}{\rho}=\psi_0(\rho).$$

我们可以用 S_l 写出 S_{l-1}.

$$\begin{aligned}S_{l+1}&=\frac{1}{(l+1)!}\left(\frac{\rho}{2}\right)^{l+1}\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}e^{i\rho x}(1-x^2)^{l+1}\mathrm{d}x\\&=-\frac{1}{(l+1)!}\left(\frac{\rho}{2}\right)^{l+1}\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}\frac{e^{i\rho x}}{i\rho}(1-x^2)^l(l+1)(-2x)\mathrm{d}x\\&=-\frac{1}{l!}\left(\frac{\rho}{2}\right)^l\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\frac{1}{2}\int_{-1}^{+1}e^{i\rho x}(1-x^2)^l\mathrm{d}x\\&=-\rho^l\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}(\rho^{-l}S_l)=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}S_l+S_l\frac{l}{\rho}.\end{aligned}$$

因此,由于这个式子和递推公式[21.4]式相同, 所以 ψ_l 的确等于积分 S_l.

我们需要下列勒让德多项式的著名关系(参看[18.14], [18.16], [18.21]):

$$P_l(x)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^l(1-x^2)^l,$$

$$\int_{-1}^{+1}P_l(x)P_{l'}(x)\mathrm{d}x=\delta_{ll'}\frac{2}{2l+1},\quad P_l(1)=1.$$

用这些关系,由[22.1]式我们立即得到

$$\begin{aligned}\frac{2}{2l+1}f_l(\rho)&=\int_{-1}^{+1}e^{i\rho x}P_l(x)\,\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{2^l l!}(i\rho)^l\int_{-1}^{+1}e^{i\rho x}(1-x^2)^l\mathrm{d}x;\end{aligned}$$

最后的表达式是 n 次分部积分的结果. 和 [22.2] 式比较, 我们得出

$$i^l 2\psi_l(\rho)=\frac{2}{2l+1}f_l(\rho),$$

并且由此得到所求的展开式:

$$\exp[i\rho\cos\vartheta]=\sum_l(2l+1)i^l\psi_l(\rho)P_l(\cos\vartheta). \qquad [22.3]$$

§23. 具有任意有心力势的薛定谔方程的解

在波动方程

$$\nabla^2u+k^2u-\frac{2m}{\hbar^2}V(r)u=0 \qquad [23.1]$$

中,我们不再用具有特殊性质的库仑势了;而仅仅要求

$$\lim_{r\to\infty}rV(r)=0. \qquad [23.2]$$

就是说,势 $V(r)$ 比库仑势衰减得快. 用通常的分离法,

$$u=v_l(\rho)Y_{l,m}(\vartheta,\varphi), \qquad [23.3]$$

并用缩写

$$kr=\rho,\quad \frac{2m}{\hbar^2}V(r)=U(r), \qquad [23.4]$$

由[23.1]式得到方程式

$$\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}(\rho v_l)+\left\{1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right\}v_l-\frac{U(r)}{k^2}v_l=0. \qquad [23.5]$$

a. 分波法

我们知道[23.5]式的解的两个特殊情况:

$$\rho\ll1:\ 如果\ U(0)\ 是有限的,\ v_l(\rho)\sim\rho^l \qquad [23.6]$$

(例如,可以用幂级数试解验证(参看[18.30]));

$$\rho\gg1:\quad v_l(\rho)\sim\frac{c}{\rho}\sin\left(\rho-l\frac{\pi}{2}+\delta_l(k)\right) \qquad [23.7]$$

(例如, 参看 [19.12]式). 后者的渐近表示将在一个练习(参看§46)中引进,其中,对 $U=0$, δ_l 定义为零. 下面,这公式中 v_l 的归

一化是这样选择的，使得 $c=1$（这个归一化和§46中的不同，后者 c 等于 $k\sqrt{2\pi}$）．这里我们要建立一种对散射问题更实用的不同的表示。[①]类似于公式[19.10]，我们取

$$u=\exp[i\rho\cos\vartheta]+f(\vartheta)\frac{\exp[i\rho]}{r}. \qquad [23.8]$$

这个试解满足两个条件：解不包含入射的球面波，并且在远离散射中心处，它仅由入射平面波组成．为了确定 $f(\vartheta)$，我们现在要求，在远距离处渐近公式[23.8]和微分方程[23.1]的普遍解一致．于是我们把这个解写成

$$u=\sum_l a_l v_l(\rho)P_l(\cos\vartheta) \qquad [23.9]$$

的形式（因为问题是轴对称的，所以不出现 φ）．把[23.8]式中的平面波按[22.3]式展开，并且在[23.9]式中，用归一化为 $c=1$ 的 $v_l(\rho)$ 的渐近表示[23.7]式，使两解相等，我们得到

$$\sum_l(2l+1)i^l\sin\left(\rho-l\frac{\pi}{2}\right)P_l(\cos\vartheta)+kf(\vartheta)e^{i\rho}$$

$$=\sum_l a_l\sin\left(\rho-l\frac{\pi}{2}+\delta_l(k)\right)P_l(\cos\vartheta). \qquad [23.10]$$

这里，我们也已用到[21.10]式．现在，用不同的形式写出这个方程式．

$$\sum_l(2l+1)i^l\frac{1}{2i}\left\{e^{i\rho}(-i)^l-e^{-i\rho}i^l\right\}P_l(\cos\vartheta)+kf(\vartheta)e^{i\rho}$$

$$=\sum_l a_l\frac{1}{2i}\left\{e^{i\rho}e^{i\delta_l}(-i)^l-e^{-i\rho}e^{-i\delta_l}i^l\right\}P_l(\cos\vartheta). \qquad [23.11]$$

令 $e^{-i\rho}$ 和 $e^{i\rho}$ 的系数等于零，我们得到

---

① 这里，这个有点任意的归一化是没有意义的，因为它只是改变了[23.9]式中的系数．

$$a_l=(2l+1)i^l\exp[+i\delta_l],\qquad [23.12]$$

$$f(\vartheta)=\frac{1}{2ik}\sum_l(2l+1)(\exp[2i\delta_l]-1)P_l(\cos\vartheta)$$

$$=\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)\sin\delta_l\exp[i\delta_l]P_l(\cos\vartheta).\qquad [23.13]$$

b. 微分散射截面和总散射截面

微分截面[20.2]式现在可以写成

$$\mathrm{d}Q=|f(\vartheta)|^2\mathrm{d}\Omega$$

$$=\frac{1}{k^2}\left|\sum_l(2l+1)\sin\delta_l\exp[i\delta_l]P_l(\cos\vartheta)\right|^2\mathrm{d}\Omega.\quad [23.14]$$

通过遍及立体角($\mathrm{d}\Omega=\sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\mathrm{d}\varphi$)的积分，我们得到总截面：

$$Q=\int\mathrm{d}Q=2\pi\int_0^\pi|f(\vartheta)|^2\sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta.$$

由于勒让德多项式的正交性，全部交叉项都等于零．这样，用归一化积分$\int_{-1}^{+1}P_l^2(x)\mathrm{d}x=2/(2l+1)$，我们可以立即写出

$$Q=\frac{4\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)\sin^2\delta_l(k).\qquad [23.15]$$

c. 相移 $\delta_l(k)$ 的计算

我们现在要计算未受扰波函数［21.10］，和受势扰的波函数[23.7]间的相移 $\delta_l(k)$．用$-r^2v_l$ 乘微分方程

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(r\psi_l)+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\psi_l=0,\qquad [23.16]$$

并和乘以 $\rho^2\psi_l$ 的方程式[23.5]相加：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left\{(r\psi_l)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(rv_l)-(rv_l)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r\psi_l)\right\}=U(r)r^2\psi_lv_l,$$

$$\left\{(r\psi_l)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(rv_l)-(rv_l)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r\psi_l)\right\}_{r=R}-0=\int_0^RU(r)r^2\psi_lv_l\mathrm{d}r.$$

[23.17]

利用三角恒等式

$$\sin\alpha\cdot\cos(\alpha+\delta)-\sin(\alpha+\delta)\cos\alpha=-\sin\delta,$$

我们得到精确公式

$$\sin\delta_l(k)=-k\int_0^{\infty}U(r)r^2\psi_l(kr)v_l(kr)\mathrm{d}r, \qquad [23.18]$$

遗憾的是，我们不了解其中的 v_l. 在某些情况下，作为第一级近似，用 ψ_l 代替 v_l 便能避免这种困难：

$$\sin\delta_l(k)=-k\int_0^{\infty}U(r)r^2\psi_l^2\mathrm{d}r. \qquad [23.19]$$

§ 24. 玻恩近似法

我们再令方程式[23.1]

$$\nabla^2u+k^2u=U(r)\cdot u,\ U(r)=\frac{2m}{\hbar^2}V(r), \qquad [24.1]$$

其解具有

$$u=\exp[ikr\cos\theta]+u_1+\cdots \qquad [24.2]$$

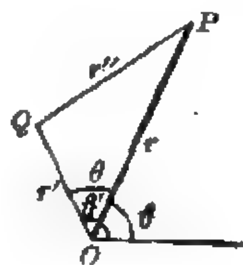
的形式，其中代表散射波的微扰 u_1 与入射平面波相比必须是微小的. 代入方程，在一级近似中我们得到

$$\nabla^2u_1+k^2u_1=U(r)\exp[ikr\cos\theta]; \qquad [24.3]$$

已略去 $U(r)u_1$ 项. 当然，我们可以继续运用这种方法并写出

$$\nabla^2u_2+k^2u_2=U(r)\cdot u_1,\ 等等$$

然而，已证明仅当一级近似就够了时，玻恩近似才是实用的.



P:场点；Q:源点；O:原点

图 24.1

在赫兹振子（图 24.1）的理论① 中已算出方程式[24.3]的解了，它

① 参看 W. 泡利：物理学讲义：电动力学.

是

$$u_1(x)=-\frac{1}{4\pi}\int\frac{U(r')\exp[ikr'\cos\vartheta']}{r''}\exp[ikr'']dV'. \quad [24.4]$$

它包含这里也需要的辐射边界条件．一般我们不用这个解．我们局限于两种特殊情况．

我们首先考察当 $P\to 0$ 时出现什么情况：

$$u_1(0)=-\frac{1}{4\pi}\int\frac{U(r')\exp[ikr'(\cos\vartheta'+1)]}{r'}dV'. \quad [24.5]$$

如果我们遍及立体角($dV'=r'^2\sin\vartheta' dr' d\vartheta' d\varphi'$)积分并略去撇号，我们得到

$$u_1(0)=-\frac{1}{k}\int U(r)\sin kr\exp[ikr]dr. \quad [24.6]$$

这个表达式代表在原点处的散射波．按照假设，它的振幅是远小于 1 的(我们已把入射波归一化为 1)，如果

$$\frac{1}{k}\int|U(r)|dr\ll 1, \quad [24.7]$$

这无疑是正确的．这是可应用微扰论的充分条件．[1]

现在，让我们来考察在远距离处解[24.4]的行为：

$$r\gg d=\text{势的有效范围}. \quad [24.8]$$

由于

$$r''=r-r'\cos\theta, \quad [24.9]$$

我们得到

$$u_1=-\frac{\exp[ikr]}{r}\frac{1}{4\pi}\int U(r')\exp[ikr'(\cos\vartheta'-\cos\theta)]dV',$$

或者，按照[22.3]式把平面波展开为勒让德多项式

---

① 所以，如果入射粒子的动能大于相互作用能，就可以使用玻恩近似法．这样，它补充了分波法，后者在低能量时是有效的．

$$u_1 = -\frac{\exp[ikr]}{r}\frac{1}{4\pi}\int U(r')r'^2 dr' \sum_{l,l'} i^l(2l+1)\psi_l(kr')(-i)^{l'}$$

$$\times(2l'+1)\psi_{l'}(kr')\int P_l(\cos\vartheta')P_{l'}(\cos\theta)d\Omega'. \qquad [24.10]$$

由于勒让德多项式的正交性(也由于图 24.1 中的 ϑ', θ 角), 仅有 $l=l'$ 的项不为零:

$$u_1 = -\frac{\exp[ikr]}{r}\int U(r')r'^2 dr' \sum_l (2l+1)^2$$

$$\times\left\{\psi_l(kr')\right\}^2\int\frac{d\Omega'}{4\pi}P_l(\cos\vartheta')P_l(\cos\theta). \qquad [24.11]$$

用关系

$$P_l(\cos\vartheta) = (2l+1)\int P_l(\cos\theta)\,P_l(\cos\vartheta')\frac{d\Omega'}{4\pi} \qquad [24.12]$$

它适用于图 24.1 中的角, 于是我们有

$$u_1 = -\frac{\exp[ikr]}{r}\sum_l (2l+1)P_l(\cos\vartheta)$$

$$\times\int_0^\infty U(r')r'^2\{\psi_l(kr')\}^2 dr'. \qquad [24.13]$$

除了由于 δ_l 很小这里已略去因子 $e^{i\delta_l}$ 外, 这结果和我们已得到的结果相当. (参看[23.8], [23.13], 和[23.19]式).

§ 25. 低能粒子的散射

结束关于碰撞理论论述时, 我们简短地考虑一种计算方法, 它用到下列两个假设: (1) 对 $r\gg a$, $U(r)\sim 0$(a 无需精确地定义); (2) $ka\ll 1$, 就是说, 入射粒子的能量是很小的. 对于 $r\gg a$, 微分方程

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rv_l)+\left(k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)v_l = U(r)v_l \qquad [25.1]$$

中的 $U(r)v_l$ 项可以略去，于是我们得到自由粒子方程的两个独立解([21.5]—[21.9])，

$$\psi_l=\frac{\xi^{(1)}+\xi^{(2)}}{2} \qquad [25.2]$$

和

$$\chi_l=\frac{\xi^{(1)}-\xi^{(2)}}{2i}. \qquad [25.3]$$

对于 $kr\gg1$，这些解的渐近形式是

$$\psi_l\sim\frac{1}{kr}\sin\left(kr-l\frac{\pi}{2}\right), \qquad [25.4]$$

$$\chi_l\sim-\frac{1}{kr}\cos\left(kr-l\frac{\pi}{2}\right). \qquad [25.5]$$

[25.1]式的普遍解为

$$v_l=A\psi_l(kr)+B\chi_l(kr). \qquad [25.6]$$

和渐近公式[23.7]

$$v_l\sim\frac{1}{kr}\sin\left(kr-l\frac{\pi}{2}+\delta_l\right) \qquad [25.7]$$

比较得出

$$A=\cos\delta, \qquad B=-\sin\delta. \qquad [25.8]$$

和前面（$r\gg a$, $kr\gg1$）对比，我们现在假设 $ka\ll kr\ll1$. 由于 $k\ll\frac{1}{r}$，[25.1]式进一步简化为

$$\frac{d^2}{dr^2}(rv_l)-\frac{l(l+1)}{r^2}(rv_l)=0. \qquad [25.9]$$

这个微分方程的解为

$$v_l=c_1\left(\frac{r}{a}\right)^l+c_2\left(\frac{r}{a}\right)^{-l-1} \quad (c_1/c_2 \text{ 与 } k \text{ 无关}). \qquad [25.10]$$

另一方面，有(常数 l)系数[25.8]的普遍解[25.6]仍然有效；因为 $kr\ll1$，我们只好把[21.11]式近似值代入．于是我们得到

$$v_l = \cos\delta_l \cdot \psi_l(kr) - \sin\delta_l \cdot \chi_l(kr) = \cos\delta_l \frac{(kr)^l}{1\times 3\times \cdots \times (2l+1)}$$

$$+1\times 3\times \cdots \times (2l-1)\sin\delta_l \cdot (kr)^{-l-1}. \qquad [25.11]$$

比较两个解得出

$$1\times 3\times \cdots \times (2l-1)\times 1\times 3\times \cdots \times (2l+1)(ka)^{-2l-1}\operatorname{tg}\delta_l$$

$$=\frac{c_2}{c_1}=\lambda\text{（自由参量，与 }k\text{ 无关）},$$

或

$$\operatorname{tg}\delta_l = \lambda \frac{(ka)^{2l+1}}{\{1\times 3\times \cdots \times (2l-1)\}^2(2l+1)}; \qquad [25.12]$$

因为 δ_l 很小，我们可以写成

$$\frac{\sin\delta_l}{k} \sim a\cdot\lambda \frac{(ka)^{2l}}{\{1\times 3\times \cdots \times (2l-1)\}^2(2l+1)}. \qquad [25.13]$$

这些关系表明，在[23.13]式中第 l 个分波的振幅是$(ka)^{2l}$ 的数量级．如果把这表达式代入总截面公式[23.15]

$$Q = 4\pi\sum_l (2l+1)\frac{\sin^2\delta_l}{k^2},$$

那么，例如，我们看出，在低能的情况下，散射的各向同性部分（$l=0$，s 波）是和入射粒子的能量无关的。

第七章　解波动方程的近似方法

§26. 均匀场中粒子的本征值问题

a. 爱里函数

设想一个粒子在均匀场中:

$$E_{势}=-F\cdot q. \tag{26.1}$$

一维波动方程

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}q^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(Fq+E)u=0, \tag{26.2}$$

可以用新变量

$$x=\sqrt[3]{\frac{2mF}{\hbar^2}}(q+q_0),\qquad E=Fq_0, \tag{26.3}$$

写成较简单的形式

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}+xu=0. \tag{26.4}$$

用试解

$$u=\int_C e^{xt}f(t)\mathrm{d}t, \tag{26.5}$$

来求解这个从衍射理论熟知的方程式. 用

$$u''=\int_C e^{xt}t^2f\mathrm{d}t,$$

$$xu=\int_C\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{xt}\right)f\mathrm{d}t=\int_C\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(e^{xt}f)\mathrm{d}t-\int_C e^{xt}f'\mathrm{d}t$$

和[26.4]式, 只要我们这样选取积分路径C使得

$$\int_C \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(e^{xt}f)\mathrm{d}t=0,\qquad [26.6]$$

我们便得到

$$t^2f-f'=0,\quad \frac{f'}{f}=t^2,\quad f=常数\times\exp\left[\frac{t^3}{3}\right].\qquad [26.7]$$

现在,用通常的归一化,这个解可以写成

$$u_k=-\frac{i}{\pi}\int_{C_k}\exp\left[xt+\frac{t^3}{3}\right]\mathrm{d}t.\qquad [26.8]$$

如果对$|t|\to\infty$,我们要求

$$\cos 3\varphi<0\qquad (t=|t|e^{i\varphi}),$$

即

$$2\pi n+\frac{\pi}{2}\leqslant 3\varphi\leqslant\frac{3\pi}{2}+2\pi n.$$

则条件[26.7]是满足的,并且保证解的收敛性. 例如,合适的区间是

$$\left(\frac{\pi}{6},\frac{\pi}{2}\right),\qquad\left(\frac{5\pi}{6},\frac{7\pi}{6}\right),\qquad\left(\frac{9\pi}{6},\frac{11\pi}{6}\right).$$

图 26.1 中阴影部分是对应于这些区间的区域.

很明显,

$$\int_C=\int_{C_1}+\int_{C_2},$$

就是说, 存在两个独立的特殊积分.

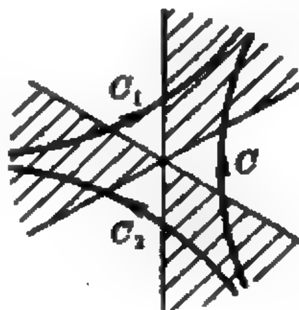


图 26.1

解 u_k 称为爱里函数,并用$A^{(k)}$来表示.从衍射理论① 我们已熟知它们了. 如果 x 是实的, 那么 $A^{(1)}$ 和 $A^{(2)}$ 是复共轭. 以后,我们也将用到其平均值

$$A=\frac{1}{2}(A^{(1)}+A^{(2)}).\qquad [26.9]$$

① 参看: W. 泡利, 物理学讲义: 光学和电子论.

最后，注意到爱里函数和柱函数有关：

$$A^{(k)}=C^{(k)}\sqrt{x}\cdot H_{\frac{1}{2}}^{(k)}\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right),\qquad C^{(1)}=\frac{\exp[i\pi/6]}{\sqrt{3}}=C^{(2)*}.$$

用鞍点法，现在我们将从积分[26.8]推导出渐近表达式。

b. 鞍点法

为了求积分

$$\int_c \exp[f(t)]\mathrm{d}t \tag{26.10}$$

的值，我们首先在由

$$f'(t_0)=0$$

定义的"鞍点"t_0附近展开$f(t)$：我们用的表达式是

$$f(t)=f(t_0)+\frac{(t-t_0)^2}{2}f''(t_0)+\cdots. \tag{26.11}$$

为了使$\mathrm{Re}(f)$尽可能快地下降，我们选取通过t_0的积分路径（按照科希和黎曼的最陡下降法）；那么，我们有$\mathrm{Im}(f)=$常数．设

$$f''(t_0)=|f''(t_0)|e^{i\alpha}. \tag{26.12}$$

因为虚部是常数，那么我们有

$$(t-t_0)^2=-\rho^2e^{i\alpha}$$

$$t-t_0=\rho\exp\left[i\frac{\pi-\alpha}{2}\right]$$

$$\mathrm{d}t=\mathrm{d}\rho\exp\left[i\frac{\pi-\alpha}{2}\right],$$

因此，

$$f(t)=f(t_0)-\frac{1}{2}|f''(t_0)|\rho^2. \tag{26.13}$$

当我们求积分[26.10]的值时，我们大胆略去展开式[26.11]的高次项．在这种近似下，我们得到

$$\int_c\exp[f(t)]\mathrm{d}t=\exp[f(t_0)]\exp\left[i\frac{\pi-\alpha}{2}\right]\times$$

$$\times\int \exp\left[-\frac{1}{2}|f''(t_0)|\rho^2\right]d\rho$$

$$=\exp[f(t_0)]\exp\left[i\frac{\pi-\alpha}{2}\right]\sqrt{\frac{2\pi}{|f''(t_0)|}},$$

最后，

$$\int_c \exp[f(t)]dt=\exp[f(t_0)]\sqrt{\frac{2\pi}{-f''(t_0)}}, \qquad [26.14]$$

其中 t_0 由 $f'(t_0)=0$ 确定．按照 [26.12] 式，还必须选取适当的平方根符号．关于上述计算的严格论证，例如，参看，柯朗和希尔伯特著《数学物理方法》(Courant and Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*).

c．均匀场中粒子的近似解

首先，我们必须确定 t_0:

$$f(t)=xt+\frac{t^3}{3},\ f'(t_0)=x+t_0^2=0,\ f''(t_0)=2t_0,\ t_0^2=-x;$$

$$t_0=\pm i\sqrt{x},\qquad 对于\ x>0, \qquad [26.15]$$

$$t_0=\pm\sqrt{|x|},\qquad 对于\ x<0. \qquad [26.16]$$

对于 $x<0$ 的情形，由于

$$f(t_0)=-\frac{2}{3}t_0^3=\pm\frac{2}{3}|x|^{3/2},$$

在解[26.8]中有两项:

$$A^{(1)}=-\frac{i}{\sqrt{\pi}}|x|^{-\frac{1}{4}}\exp\left[+\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right]$$

$$+\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}|x|^{-\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right], \qquad [26.17]$$

$$A^{(2)}=+\frac{i}{\sqrt{\pi}}|x|^{-\frac{1}{4}}\exp\left[+\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right]$$

$$+\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}|x|^{-\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right]. \qquad [26.18]$$

如图 26.2 所示，这是因为积分路径绕过两个鞍点．当然，右边的鞍点只被覆盖了一半，因此，对解的贡献只是其值的一半．

在 $x>0$ 的情况下，在每条积分路径 C_1 和 C_2 上只有一个鞍点(参看图 26.3)．其解(用著名的 $\exp[i(\pi/4)]$)是：

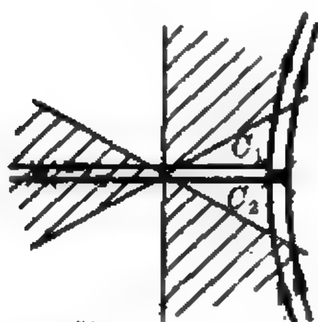


图 26.2

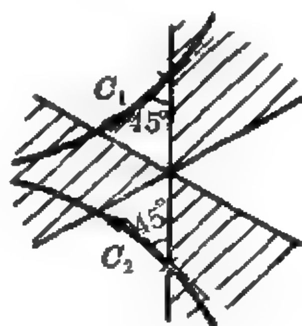


图 26.3

$$A^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}x^{-\frac{1}{4}}\exp\left[i\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}-\frac{1}{4}\pi\right)\right], \qquad [26.19]$$

$$A^{(2)}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{1}{4}}\exp\left[-i\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}-\frac{1}{4}\pi\right)\right]. \qquad [26.20]$$

所以，两个函数的平均值[26.9]是

$$x<0: \quad A=\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}|x|^{-\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{2}{3}|x|^{\frac{3}{2}}\right], \qquad [26.21]$$

$$x>0: \quad A=\frac{1}{\sqrt{\pi}}x^{-\frac{1}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}-\frac{1}{4}\pi\right). \qquad [26.22]$$

必须再次强调，这个解表示一个近似．虽然积分[26.8]从负无限大伸展到正无限大，但泰勒展开式[26.11]只适用于鞍点的邻域．当然，对积分的主要贡献确实是来自鞍部区域．我们进一步指出，因为误差具有表达式本身的数量级，所以[26.17]和[26.18]式中 $A^{(1)}$ 和 $A^{(2)}$ 的第一项是靠不住的．然而，这些项在[26.21]和[26.22]①式中抵消了．

① 英译本中漏译"和[26.22]式"这几个字．——中译者注

§ 27. 温-克-布(WKB)三氏法

G. 温采尔和 L. 布里渊已给出一种能获得波动方程（如果它是可以分离成各别的独立变量的方程）近似解的方法①. H. A. 克喇末斯和他的学生提出这种方法的数学基础并把它扩充了②. 求解的方式类似于在光学中由普遍波动方程过渡到程函方程的方法③.

我们来解一维定态波动方程，

$$u''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]u=0,\ 其中\ E-V(x)>0, \qquad [27.1]$$

并采用试解

$$u=\exp\left[\frac{i}{\hbar}S\right]. \qquad [27.2]$$

在这种方法中，从 u 的一次二阶微分方程[27.1]，我们得到一个 $dS/dx=S'$ 的二次一阶微分方程（里卡蒂[Riccati]微分方程）：

$$S'^2=2m[E-V(x)]+i\hbar S''. \qquad [27.3]$$

---

① L. Brillouin, *Compt. Rend.* **183**, 24(1926); *J. de. Physique* **7**, 353(1926); G. Wentzel, *Z. Physik* **38**, 518(1926); 也可参看 H. Jeffreys, *Proc. London Math. Soc.* (2)**23**, 428(1923).

② H. A. Kramers, *Z. Physik* **39**, 828(1926).

③ 在光学（参看参考书 1. 第 127 页）中我们用试解

$$\psi=\exp[ik_0S],$$

求解定态波动方程

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+n^2k_0^2\psi=0.$$

我们假设 S 是缓变量；即在表达式

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\left\{-k_0^2\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+ik_0\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right\}\psi$$

中只用到 k_0 的最高次幂，由此得到表示光线光学特征的程函微分方程

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2=n^2.$$

为了求解这一个方程，我们把 S 按 h/i 的幂展开(这个幂级数是渐近型的)：

$$S=S_0+\frac{h}{i}S_1+\cdots. \qquad [27.4]$$

把[27.4]式代入[27.3]式，于是得出

$$S_0'=\sqrt{2m[E-V(x)]}, \qquad [27.5]$$

并导出解

$$S_0=\int_{x_1}^{x}\sqrt{2m[E-V(x)]}\mathrm{d}x. \qquad [27.6]$$

如果我们令

$$p=S_0',$$

那么，在零级近似($h=0$)，我们得到在经典力学中所熟悉的关系

$$p(x)=\sqrt{2m[E-V(x)]}. \qquad [27.7]$$

在 $E-V(x)\geqslant 0$ 的区间 (x_1, x_2) 中，粒子的轨道是经典的．也可能存在很多这样的区间；然而，暂时我们假设只有一个(图27.1)．

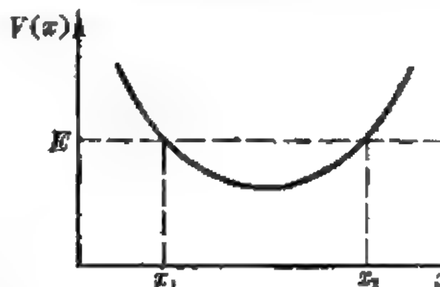


图 27.1

由[27.3]式得到下一级近似是

$$2S_1'S_0'+S_0''=0,$$

$$S_1=-\frac{1}{2}\ln S_0'+\text{常数}.$$

我们现在得到波动方程[27.1]的解

$$u_\pm=\frac{\text{常数}}{\sqrt{p(x)}}\times\exp\left[\frac{i}{h}\cdot\int_{x_1}^{x}p(x)\mathrm{d}x\right]; \qquad [27.8]$$

$E-V>0$：振动的(经典上可达到的)，

$E-V<0$：阻尼的(经典上不可达到的)．

符号±提醒我们，涉及到的是对应于平方根[27.7]的两种符号的两个线性独立的解．在

$$p(x)\equiv\sqrt{2m[E-V(x)]}=0 \qquad [27.9]$$

的邻近，这个解是不能用的；就是说，它在经典的转折点（在那里，的确 $E=V(x)$）邻域无效。

在这区域中，我们可以把它与我们已了解的爱里函数联系起来．为此，必须把展开式

$$\frac{p^2(x)}{2m}=E-V(x)=(x-x_1)F_1+\cdots,\quad F_1\equiv -V'(x_1)>0, \qquad [27.10]$$

代入方程式[27.1]：

$$u''+\frac{2mF_1}{\hbar^2}(x-x_1)u=0. \qquad [27.11]$$

这个方程式的解是变数

$$\xi=(x-x_1)\cdot\sqrt[3]{\frac{2mF_1}{\hbar^2}} \qquad [27.12]$$

的爱里函数．为了寻求 $A^{(1)}$ 和 $A^{(2)}$ 正确的组合，我们首先考虑 $x<x_1$ 的区域，在此区域中 u 必须是阻尼的（经典地不可达到的）．用 $p=-i|p|$，[27.8]式为

$$u=\frac{常数}{\sqrt{|p|}}\times\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1}|p|\,dx\right],\quad x<x_1. \qquad [27.13]$$

由[27.10]和[27.12]式，我们得到

$$\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1}|p|\,dx=\sqrt{\frac{2mF_1}{\hbar^2}}\int_x^{x_1}|x-x_1|^{\frac{1}{2}}dx=\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}.$$

于是，按照[26.21]式，对于 $x<x_1$，我们得

$$u=常数\times|\xi|^{-\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}}\right]=常数\times A(\xi),$$

而关于 $x>x_1$ 的解由[26.22]式给出

$$\begin{aligned}u&=常数\times\xi^{-\frac{1}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}-\frac{1}{4}\pi\right)\\&=\frac{常数}{\sqrt{p}}\times\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}p\,dx-\frac{1}{4}\pi\right).\end{aligned} \qquad [27.14]$$

类似的公式适用于第二个转折点，x_2．用

$$\frac{p^2(x)}{2m}=E-V(x)=-(x-x_2)F_2+\cdots,$$

$$F_2\equiv+V'(x_2)>0,\quad \eta=\sqrt[3]{\frac{2mF_2}{h^2}}(x_2-x),$$

在区域 $x>x_2$ 中，我们得到

$$u=\frac{\text{常数}}{\sqrt{|p|}}\times\exp\left[-\frac{1}{h}\int_{x_2}^{x}|p|\mathrm{d}x\right]=\text{常数}$$

$$\times|\eta|^{-\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{2}{3}|\eta|^{\frac{3}{2}}\right]=\text{常数}\times A(\eta)\qquad[27.15]$$

而在区域 $x<x_2$，那么我们有

$$u=\text{常数}\times\eta^{-\frac{1}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}\eta^{\frac{3}{2}}-\frac{1}{4}\pi\right)$$

$$=\frac{\text{常数}}{\sqrt{p}}\times\cos\left(\frac{1}{h}\int_{x}^{x_2}p\mathrm{d}x-\frac{1}{4}\pi\right).\qquad[27.16]$$

这些表达式代表在$-\infty$到$+\infty$区域中的波函数．在这些边界处波函数指数地趋近于零．在两个经典转折点 x_1 和 x_2 处，基本上改变了它的结构．关于这些解的行为的更详细的讨论，应该参考克喇末斯和他的合作者的原文．为了得到两对解([27.13]，[27.14]，和[27.15]，[27.16])的一个唯一的描述，我们还必须要求在公共区间(x_1, x_2)中，

$$\cos\left(\frac{1}{h}\int_{x_1}^{x}p(x)\mathrm{d}x-\frac{1}{4}\pi\right)=\pm\cos\left(\frac{1}{h}\int_{x}^{x_2}p(x)\mathrm{d}x-\frac{1}{4}\pi\right),$$

[27.17]

$$\frac{1}{h}\int_{x_1}^{x_2}p(x)\mathrm{d}x-\frac{\pi}{2}=n\pi.\qquad[27.18]$$

如果我们用

$$J=\oint p_x\mathrm{d}x=2\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(E-V(x))}\mathrm{d}x,$$

表示著名的相积分，我们不再得到旧玻尔量子条件，

$$J = n \cdot 2\pi\hbar; \qquad [27.19]$$

而是,得到精确的条件

$$J = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot 2\pi\hbar \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots). \qquad [27.20]$$

当然,由于我们的推导,甚至这个表达式也是一个近似,随着 n 的增加,它会变得好一些. 误差是 $1/n$ 的数量级;然而,常数却是正确的. 在某些情况中,例如,谐振子(参看[15.20]式)对任意的 n 都精确地遵从量子条件[27.20]. 这是和势的特殊形式有关①.

直到现在,我们总是只假设一个 $E - V(x) > 0$ 的区间;这是我们进行推导的一个重要假设.如果存在两个以上这样的区间,由于波函数在经典地不可达到的中介区域里不为零(参看[27.13]和[27.15]式),那么便出现新的效应. 所以,波函数可能从一个区域 (x_1, x_2)"漏"到另一个区域 (x_3, x_4)去,尽管它们被经典地不可超越的势垒所分开. 这种典型的波动力学现象称为**隧道效应**;在量子论的很多应用中,它起着很大的作用. 我们将在一个练习中(参看§41)论及这个效应.

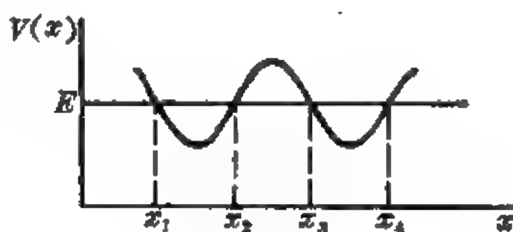


图 27.2

① 参看,例如,E. C. Kemble, *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics*. pp. 574 ff.

第八章　矩阵和算符. 微扰理论

§28. 矩阵和算符间的普遍关系. 变换理论

我们回顾§16的讨论，并且重复那里给出的矩阵元的定义. 令

$$u_1(q),\cdots,u_n(q),\cdots$$

为一完全正交归一函数集. 于是我们能写出

$$\underline{F}u_n=\sum_k u_k(k|\underline{F}|n), \qquad [28.1]$$

其中

$$(k|\underline{F}|n)=\int u_k^*(\underline{F}u_n)\mathrm{d}q \qquad [28.2]$$

代表算符 $\underline{F}$ 关于 u_n 的矩阵元.

按照[28.2]式，厄密性条件[12.5]式

$$\int(\underline{F}u_k)^*u_n\mathrm{d}q=\int u_k^*(\underline{F}u_n)\mathrm{d}q, \qquad [28.3]$$

对矩阵来说意味着

$$(k|\underline{F}|n)=(n|\underline{F}|k)^*. \qquad [28.4]$$

类似地定义另外一个矩阵，

$$\underline{G}u_n=\sum_m u_m(m|\underline{G}|k),\ (k|\underline{G}|m)=\int u_k^*(\underline{G}u_m)\mathrm{d}q, \qquad [28.5]$$

我们计算算符 $\underline{GF}$ 的矩阵：

$$(\underline{GF})u=\underline{G}(\underline{F}u), \qquad [28.6]$$

$$\underline{G}(\underline{F}u_n)=\sum_k(\underline{G}u_k)(k|\underline{F}|n)$$

$$=\sum_m u_m\sum_k(m|\underline{G}|k)(k|\underline{F}|n)\equiv\sum_m u_m(m|\underline{GF}|n). \quad [28.7]$$

用通常意义下的矩阵乘法进行[28.7]式的最后一步

$$(m|\underline{GF}|n)\equiv\sum_k(m|\underline{G}|k)(k|\underline{F}|n), \quad [28.8]$$

它表明算符的乘法对应于它所关联的矩阵乘法.

我们现在要研究,如果我们从 u_n 过渡到另一完全正交函数集 v_A,矩阵怎样改变. 我们可以按 u_n 把 v_A 展开:

$$v_A=\sum_n u_n(n|\underline{S}|A)\equiv\underline{S}u_A, \quad [28.9]$$

其中

$$(n|\underline{S}|A)=\int v_A u_n^* \mathrm{d}q. \quad [28.10]$$

[28.9]式定义的算符 $\underline{S}$,使得每一个函数 $f=a_1u_1+a_2u_2+\cdots$,和具有相同展开系数的函数 $g=a_1v_1+a_2v_2+\cdots$联系起来. 我们把 $\underline{S}$ 叫做变换算符;它和迄今考察过的厄密算符根本不同.

a. 幺正变换

由于完全性关系[9.9],我们得到

$$\int v_A^* v_B \mathrm{d}q=\sum_n(n|\underline{S}|A)^*(n|\underline{S}|B). \quad [28.11]$$

用这个关系,v_A 的正交性和归一化条件变为

$$\left.\begin{aligned}&\sum_n(n|\underline{S}|A)^*(n|\underline{S}|B)=(A|\underline{S}^+\underline{S}|B)=\delta_{AB}\\ \text{或}\quad&\underline{S}^+\underline{S}=1\end{aligned}\right\}, \quad [28.12]$$

其中 $\underline{S}^+$ 表示从 $\underline{S}$ 得到的厄密共轭矩阵:

$$(A|\underline{S}^+|n)\equiv(n|\underline{S}|A)^*. \quad [28.13]$$

厄密共轭矩阵的一条规则是

$$(\underline{F}\underline{G}\underline{H}\cdots)^{+}=\cdots\underline{H}^{+}\underline{G}^{+}\underline{F}^{+}. \qquad [28.14]$$

作为 v_A 的完全性条件，我们可以要求每一个 u_n 是能按 v_A 展开的：

$$u_n=\sum_A v_A(A|\underline{S}^{+}|n),\ (A|\underline{S}^{+}|n)=\int u_n v_A^{*}\mathrm{d}q. \qquad [28.15]$$

如果约定 v_A 是完全的，那么类似于[28.12]式的条件必须成立：

$$(n|\underline{S}\underline{S}^{+}|m)=\delta_{nm},\ \underline{S}\underline{S}^{+}=1; \qquad [28.16]$$

这表示存在 $\underline{S}$ 的逆算符，$\underline{S}^{-1}$．对有限秩的方阵总是这种情况；就是说，由[28.12]式总可以得出[28.16]式，反过来也是这样．然而，矩形矩阵就不是这样了，所以，无限秩的矩阵也不是这样，因为那时说方阵就不再有意义了．

一个满足[28.12]和[28.16]式的矩阵称为**幺正的**，并且对应的变换称为**幺正变换**，幺正变换保持正交性、归一化和完全性．

我们现在要研究，当我们从 u_n 过渡到 v_A 时，[28.2]式定义的矩阵 $\underline{F}$ 是怎样变换的．用[28.9]式，并类似于

$$(k|\underline{F}|l)=\int u_k^{*}(\underline{F}u_l)\mathrm{d}q, \qquad [28.17]$$

我们写出

$$\begin{aligned}(A|\underline{F}'|B)&=\int v_A^{*}(\underline{F}v_B)\mathrm{d}q\\&=\int\sum_n\sum_m(A|\underline{S}^{+}|u)u_n^{*}(\underline{F}u_m)(m|\underline{S}|B)\mathrm{d}q\\&=\sum_n\sum_m(A|\underline{S}^{+}|n)(n|\underline{F}|m)(m|\underline{S}|B)\\&=(A|\underline{S}^{+}\underline{F}\underline{S}|B).\end{aligned} \qquad [28.18]$$

这样，

$$\underline{F}'=\underline{S}^{+}\underline{F}\underline{S}\quad(\text{相似变换}). \qquad [28.19]$$

并且，因为对幺正变换 $\underline{S}^{+}=\underline{S}^{-1}$，因此

$$\underline{F}'=\underline{S}^{-1}\underline{F}\underline{S}. \qquad [28.20]$$

容易证明，这变换保持 $\underline{F}$ 的厄密性；就是说，如果 $\underline{F}$ 是厄密的，$\underline{F}'$ 也是厄密的。

b. 本征值问题的表述

如果我们写出哈密顿算符关于波动方程

$$\underline{H}u=Eu$$

的本征函数的矩阵元

$$(n|\underline{H}|m)=\int u_n^*(\underline{H}u_m)\mathrm{d}q. \qquad [28.21]$$

我们得到

$$(n|\underline{H}|m)=E_m\int u_n^*u_m\mathrm{d}q=E_m\delta_{nm}; \qquad [28.22]$$

就是说，在这个系统中定义的哈密顿矩阵元是对角的，并且它的对角元是波动方程的能量本征值 E_n。这样，求波动方程的解也对应于哈密顿矩阵（相对于某一正交归一化函数集写出的）对角化；就是说，利用一个按照[28.19]式必须满足

$$(n|\underline{S}^{+}\underline{H}\underline{S}|m)=E_n\delta_{nm} \qquad [28.23]$$

的幺正变换矩阵 $\underline{S}$，作一个主轴变换．用 $\underline{S}\underline{S}^{+}=1$，我们也可以写出

$$(n|\underline{H}\underline{S}|m)=(n|\underline{S}\underline{E}|m), \qquad [28.24]$$

或

$$\sum_k(n|\underline{H}|k)(k|\underline{S}|m)=(n|\underline{S}|m)E_m. \qquad [28.25]$$

用这种方式，原则上不但可能计算能量的本征值，而且也可以计算波动方程的对应本征函数 u_n；不过，能进行计算的只有少数几种情况，例如，谐振子和微扰论。

c. 把矩阵方法扩展到连续谱

矩阵演算的运算可以推广到以连续变量代替分立指标的情况

中，例如，如果我们考虑矩阵积 $\underline{F}\cdot\underline{G}$

$$\sum_k (n|\underline{F}|k)(k|\underline{G}|m), \qquad [28.26]$$

并假设 k 是连续变量，那么我们只需用积分代替求和：

$$\sum_k \longrightarrow \int \rho(k_1, \cdots, k_f)\mathrm{d}^f k. \qquad [28.27]$$

代替克罗内克尔(Kronecker)δ，我们得到狄拉克函数：

$$\delta_{kk'} \longrightarrow \rho^{-1}(k)\delta^f(k-k'). \qquad [28.28]$$

这样，例如，我们可以把条件[28.12]和[28.16]式重新写为：

$$\underline{S}^+\underline{S}=1,\ \sum_n (A|\underline{S}^+|n)(n|\underline{S}|B)=\rho^{-1}(A)\delta(A-B); \quad [28.29]$$

$$\underline{S}\underline{S}^+=1,\ \int (n|\underline{S}|A)\rho(A)\mathrm{d}A(A|\underline{S}^+|m)=\delta_{nm}. \qquad [28.30]$$

因为"密度函数"ρ 也能有分立谱，所以甚至可能兼有分立谱和连续谱.

§29. 矩阵表象中微扰论的普遍形式体系

我们回顾在§16中具有微扰势的线性谐振子的例子，并作更一般的断言：如果哈密顿矩阵有

$$\underline{H}=\underline{H}^{(0)}+\underline{V} \qquad [29.1]$$

的形式，其中 $\underline{H}^{(0)}$ 是对角的，而 $\underline{V}$ 不是对角的，但与 $\underline{H}$ 相比，它微小到满足下列判据

$$|(m|\underline{V}|n)| \ll |(m|\underline{H}|m)-(n|\underline{H}|n)| \quad (m\neq n). \qquad [29.2]$$

那么，我们就可以进行微扰计算. 用[28.25]式我们可以写出

$$E_n^{(0)}(n|\underline{S}|m)+\sum_k (n|\underline{V}|k)(k|\underline{S}|m)=(n|\underline{S}|m)E_m, \qquad [29.3]$$

其中 $E_n^{(0)}$ 是 $\underline{H}^{(0)}$ 的本征值. 这个关系仍然是正确的. 然而，现在

由于[29.2]式，我们作一个展开式①：

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots, \qquad [29.4]$$

$$\underline{S} = \underline{S}^{(0)} + \underline{S}^{(1)} + \underline{S}^{(2)} + \cdots, \quad \underline{S}^{(0)} = 1. \qquad [29.5]$$

（我们已避免引进参量 ε. 我们约定，在展开式中 $E_n^{(i)}$ 和 $\underline{S}^{(i)}$ 分别是比 $E_n^{(i-1)}$ 和 $\underline{S}^{(i-1)}$ 小一个数量级，而不再写成

$$\underline{S} = 1 + \varepsilon \underline{S}^{(1)} + \varepsilon^2 \underline{S}^{(2)} + \varepsilon^3 \underline{S}^{(3)} + \cdots.）$$

a. 第一级近似

代入[29.3]式，得出第一级近似

$$E_n^{(0)}\delta_{nm} + E_n^{(0)}(n|\underline{S}^{(1)}|m) + (n|\underline{V}|m)$$
$$= E_n^{(0)}\delta_{nm} + E_n^{(1)}\delta_{nm} + (n|\underline{S}^{(1)}|m)E_m^{(0)},$$
$$E_n^{(0)}(n|\underline{S}^{(1)}|m) + (n|\underline{V}|m)$$
$$= E_n^{(1)}\delta_{nm} + (n|\underline{S}^{(1)}|m)E_m^{(0)}. \qquad [29.6]$$

在求解这个方程中，我们要区别两种情况：

1. $n \neq m$:

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(n|\underline{S}^{(1)}|m) = -(n|\underline{V}|m). \qquad [29.7]$$

在 $\underline{H}^{(0)}$ 是简并的情况下，只有

$$(n|\underline{V}|m) = 0 \text{ 对于 } E_n^{(0)} = E_m^{(0)}, n \neq m, \qquad [29.8]$$

满足上列方程；这样，如果存在简并，为了可能进行微扰计算，就必须满足这个条件. 如果本征值是十分靠近在一起的，近似也将是

---

① 由于[29.2]式，我们可以首先令[29.3]式的 $(n|\underline{V}|k)$ 对于 $k \neq n$ 近似地等于零：

$$\{E_n^{(0)} + (n|\underline{V}|n) - E_m\}(n|\underline{S}|m) \simeq 0.$$

我们可以给 $\underline{H}$ 的本征函数这样编号，使得

$$E_n \simeq E_n^{(0)} + (n|\underline{V}|n) \qquad (m = n)$$

和

$$(n|\underline{S}|m) \simeq 0, \qquad (m \neq n)$$

这样，由于 $\underline{S}\underline{S}^+ = \underline{S}^+\underline{S} = 1$，我们得到

$$(n|\underline{S}|n) \simeq 1.$$

这就证明了展开式[29.4]和[29.5]是正确的.

很差的；由于这种原因，$\underline{V}$ 必须满足条件[29.2]. 由[29.7]式我们得到

$$(n|\underline{S}^{(1)}|m)=-\frac{(n|\underline{V}|m)}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}. \qquad [29.9]$$

2. $m=n$:

$$E_n^{(1)}=(n|\underline{V}|n). \qquad [29.10]$$

这样，在第一级近似中，能量本征值改变了等于微扰的对角矩阵元的量值.

因为变换矩阵 $\underline{S}$ 必须是幺正的，

$$\underline{S}^+\underline{S}=I,$$

在第一级近似中我们有

$$\underline{S}^{(1)}+\underline{S}^{(1)+}=0, \qquad [29.11]$$

这意味着$(n|\underline{S}^{(1)}|n)$是纯虚的，但其他方面是完全任意的，这对应于我们总是可以作相变换这一事实.

b. 第二级近似

在第二级近似中，[29.3]、[29.4]和[29.5]式给出

$$E_n^{(0)}\delta_{nm}+E_n^{(0)}(n|\underline{S}^{(1)}|m)+E_n^{(0)}(n|\underline{S}^{(2)}|m)+(n|\underline{V}|m)$$
$$+\sum_k(n|\underline{V}|k)(k|\underline{S}^{(1)}|m)=E_n^{(0)}\delta_{nm}+E_n^{(1)}\delta_{nm}+E_n^{(2)}\delta_{nm}$$
$$+(n|\underline{S}^{(1)}|m)E_m^{(0)}+(n|\underline{S}^{(1)}|m)E_m^{(1)}+(n|\underline{S}^{(2)}|m)E_m^{(0)};$$

用[29.6]式，这个式子变成

$$(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})(n|\underline{S}^{(2)}|m)+\sum_k(n|\underline{V}|k)(k|\underline{S}^{(1)}|m)$$
$$=\delta_{nm}E_n^{(2)}+(n|\underline{S}^{(1)}|m)E_m^{(1)}. \qquad [29.12]$$

我们再次区分两种情况：

1. $n\neq m$:

$$(n|\underline{S}^{(2)}|m)=\frac{\{(n|\underline{V}|n)-(m|\underline{V}|m)\}(n|\underline{V}|m)}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})^2}$$

$$+\sum_{\substack{k\\k\neq n\\k\neq m}}\frac{(n|\underline{V}|k)(k|\underline{V}|m)}{(E_k^{(0)}-E_m^{(0)})(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})}. \quad [29.13]$$

2. $n=m$:

$$E_n^{(2)}=-\sum_{\substack{k\\k\neq n}}\frac{(n|\underline{V}|k)(k|\underline{V}|n)}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}=-\sum_{\substack{k\\k\neq n}}\frac{|(n|\underline{V}|k)|^2}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}$$

[29.14]

(最低本征值总是负的).

c. $\underline{H}^{(0)}$的简并性

在$\underline{H}^{(0)}$是简并的情况下,我们已经看到,$\underline{V}$必须满足条件[29.8]我们才能进行微扰计算，为了使g重简并度($E_1^{(0)}=E_2^{(0)}=\cdots=E_g^{(0)}=E_0$)达到这个要求，我们必须选取对应的$g$维子空间，并且在这个子空间中精确地求解方程[28.25]

$$\sum_{k=1}^{g}(n|\underline{H}|k)(k|\underline{S}|A)=E_A(n|\underline{S}|A) \quad [29.15]$$

$$n, A=1, 2, \cdots, g,$$

在这种情况下满足[29.8]式. 方程式[29.15]代表g个方程组(用指标A标记),每个方程组包含g个未知量$(n|\underline{S}|A)$的g个线性齐次方程式(用指标n标记). 每个方程组的系数矩阵是

$$\underline{H}-E_A\cdot I$$

$$=\left\|\begin{matrix}E_0+V_{11}-E_A & V_{12}\cdots & \cdots & \cdots V_{1g}\\ V_{21} & E_0+V_{22}-E_A & & \vdots\\ \vdots & & \ddots & \vdots\\ \vdots & & & \vdots\\ V_{g1}\cdots & \cdots\quad\cdots\quad\cdots & & \cdots E_0+V_{gg}-E_A\end{matrix}\right\|, \quad [29.16]$$

众所周知,只有在条件

$$\det\|\underline{H}-E_A\cdot I\|=0 \quad [29.17]$$

下才存在非零解. 这是一个 E_A 的 g 次代数方程, 它的解确定能量的本征值. 一旦解出这个方程式, 求解[29.15]式就不存在更多的障碍了.

在结束时, 我们注意到这一本征值问题不过是一个著名的$g\times g$ 矩阵$\underline{H}$的主轴变换, 其厄密性要求全部本征值都是实的. 方程式[29.17]称为久期方程, 因为它首次出现是和行星轨道的长期微扰计算有关.

§30. 与时间有关的微扰

如果我们有一个与时间有关的微扰, 那么, 当然我们只关心与时间有关的波动方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\underline{H}_0\psi+\underline{V}(t)\psi \tag{30.1}$$

的解. 我们用通常的方法(参看, 例如, [7.7]式)把这个方程的解展开, 在这种情况下, (如狄拉克所建议的那样)按未受扰的本征函数 u_n 展开:

$$\psi=\sum_n a_n(t)u_n\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t\right], \tag{30.2}$$

其中

$$\underline{H}_0u_n=E_n^{(0)}u_n. \tag{30.3}$$

把[30.2]式代入[30.1]式, 并记住[30.3]式, 我们得到

$$i\hbar\sum_m\frac{\mathrm{d}a_m}{\mathrm{d}t}u_m\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t\right]$$
$$=\sum_m a_m(t)\underline{V}u_m\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t\right]. \tag{30.4}$$

我们用 u_n^*乘这个方程式并对 $\mathrm{d}q$ 积分:

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t\right]$$

$$= \sum_m a_m(t)(n|\underline{V}|m)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_m^{(0)}t\right] \quad [30.5]$$

或

$$i\hbar\frac{da_n}{dt} = \sum_m a_m(t)(n|\underline{V}|m)\exp\left[+\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})t\right]. \quad [30.6]$$

我们求一个给定初值，

$$a_n(0) = a_n^{(0)}$$

的解，我们也把这个解展开为：

$$a_n(t) = a_n^{(0)} + a_n^{(1)}(t) + a_n^{(2)}(t) + \cdots. \quad [30.7]$$

那么，初始条件是

$$a_n^{(1)}(0) = a_n^{(2)}(0) = \cdots = 0. \quad [30.8]$$

为简洁计，我们引进

$$(n|\Omega|m) \equiv (n|\underline{V}|m)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})t\right], \quad [30.9]$$

并通过[30.6]式对 t 积分，我们得到

$$a_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_m a_m^{(0)}\int_0^t (n|\Omega|m)dt, \quad [30.10]$$

$$a_n^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_l\int_0^t (n|\Omega|l)a_l^{(1)}(t)dt$$

$$= -\frac{1}{\hbar^2}\sum_m a_m^{(0)}\sum_l\int_0^t (n|\Omega|l)(\tau)d\tau\int_0^\tau (l|\Omega|m)(\tau')d\tau'. \quad [30.11]$$

这些公式适用于与时间有关的 $\underline{V}$① 和与时间无关的 $\underline{V}$②。然而，如

① 例如，它们可以用来计算光的受激发射和吸收。在这种情况下，由入射辐射场给出微扰算符 $\underline{V}$。

② 因为我们仅从 0 积分，我们也可以假设，例如，通过系统到激发态的跃迁，在 $t=0$ 时"引入"一个恒定的微扰 $\underline{V}$。

果V对时间是常数，我们能够算出这些积分的值：

$$a_n^{(1)}(t)=-\sum_m a_m^{(0)}(n|V|m)\frac{\exp[(i/h)(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})t]-1}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}, \tag{30.12}$$

$$a_n^{(2)}(t)=\sum_m a_m^{(0)}\sum_l (n|V|l)(l|V|m) \times\left[\frac{\exp[(i/h)(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})t]-1}{(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})(E_l^{(0)}-E_m^{(0)})}-\frac{\exp[(i/h)(E_n^{(0)}-E_l^{(0)})t]-1}{(E_n^{(0)}-E_l^{(0)})(E_l^{(0)}-E_m^{(0)})}\right]. \tag{30.13}$$

如果$E_n^{(0)}=E_m^{(0)}$(共振分母)，这一近似并不一定差．因为，由于我们已从0到t积分，于是分子也等于零．所以，在[30.12]式中包含共振分母的项是

$$-a_m^{(0)}(n|V|m)\frac{i}{h}t,$$

并且这一近似可适用于这样的时刻，即

$$|(n|V|m)t|\ll h.$$

另一方面，只有通过精确地探讨简并子空间才能得到一个适用于较长时间的解．

我们现在来探讨重要的特殊情况，其中两个能量值中之一，$E^{(0)}$，处于连续谱中．例如，如果一个原子从一个激发态跃迁到基态，在这过程中不是发射一个γ量子而是从一个较外壳层抛出一个电子①，就是这种情况；这个自由电子有个连续能谱(或，在远隔的两壁情况下，相邻能量的本征值分布十分稠密——准连续能谱)．我们在[30.12]式中所用的初始值是

① 如果原子的激发是由于去掉一个内层电子，这种无辐射跃迁称为俄歇效应．例如，在E. H. S. Burhop, *The Auger Effect and Other Radiationless Transitions.* 一书中可以找到详细的论述．

$$a_n^{(0)}=0,\ 对\ n\neq m,\quad a_n^{(0)}=1\ 对\ n=m;\qquad [30.14]$$

就是说，我们考虑一个已知是来自态m的电子的抛出．在连续谱中，我们用k作为变量，因此我们得到

$$a^{(1)}(k,t)=-(k|V|m)\frac{\exp\{(i/h)[E^{(0)}(k)-E_m^{(0)}]t\}-1}{E^{(0)}(k)-E_m^{(0)}}.$$

[30.15]

我们现在计算在 0 到 t 的时间间隔中，从态m到任意态k的跃迁几率，其中

$$E_m^{(0)}-\frac{1}{2}\Delta E<E^{(0)}(k)<E_m^{(0)}+\frac{1}{2}\Delta E.\qquad [30.16]$$

结果是

$$W(k,t)=\int|a^{(1)}(k,t)|^2\mathrm{d}k$$

$$\sim|(k|V|m)|^2\cdot\int\mathrm{d}k\ \frac{4\sin^2(t/2h)[E^{(0)}(k)-E_m^{(0)}]}{[E^{(0)}(k)-E_m^{(0)}]^2}.$$

[30.17]

设$P(E)$是在能量壳层

$$\mathrm{d}k=P(E)\mathrm{d}E\qquad [30.18]$$

上态的数目．

用缩写

$$x=\frac{t}{2h}[E^{(0)}(k)-E_m^{(0)}],\qquad [30.19]$$

于是我们得到

$$W(k,t)=P(E)|(k|V|m)|^2 4\frac{t}{2h}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}\mathrm{d}x.\qquad [30.20]$$

由条件

$$\frac{\Delta E\cdot t}{h}\gg 1,\qquad [30.21]$$

我们证明积分限从$-\infty$到$+\infty$是正确的．此积分等于π；所以

$$W(k,t)=P(E)|(k|V|m)|^2\frac{2\pi t}{h}. \qquad [30.22]$$

这个公式特别重要，因为它给出两个完全任意态之间的跃迁几率．由于公式的重要性，费密称它为“黄金律”。

第九章　角动量和自旋

§ 31. 一般对易关系

角动量的本征值问题及其对应的变换在波动力学中占有重要的地位. 在讨论对称陀螺的本征值问题的习题(参见 § 47)中我们已部分地涉及到这些问题. 在此我们只局限于最本质的要点. 如欲深入此问题,可参阅详细论述这些问题的著作(例如, **P. A. M.** 狄拉克,量子力学).

对于具有如下角动量的粒子

$$\left.\begin{aligned}&\underline{P}\equiv(\underline{P}_1,\underline{P}_2,\underline{P}_3)=\frac{1}{\hbar}(\underline{x}\times\underline{p})\quad(\text{以}\ \hbar\ \text{为量度单位})\\&\underline{P}_1=\frac{1}{\hbar}(\underline{x}_2\underline{p}_3-\underline{x}_3\underline{p}_2)=\frac{1}{i}\left(x_2\frac{\partial}{\partial\underline{x}_3}-\underline{x}_3\frac{\partial}{\partial\underline{x}_2}\right),\cdots\end{aligned}\right\},\qquad[31.1]$$

(循环交换指标)

我们有对易关系

$$[\underline{P}_1,\underline{P}_2]=\underline{P}_1\underline{P}_2-\underline{P}_2\underline{P}_1=i\underline{P}_3,\cdots\qquad[31.2]$$

(循环交换指标).

对于任意数目的粒子,这些对易关系也都成立,此处

$$\underline{P}_1=\frac{1}{i}\sum_r\left(\underline{x}_2^{(r)}\frac{\partial}{\partial\underline{x}_3^{(r)}}-\underline{x}_3^{(r)}\frac{\partial}{\partial\underline{x}_2^{(r)}}\right)$$

$$=\frac{1}{\hbar}\sum_r(\underline{x}_2^{(r)}\underline{p}_3^{(r)}-\underline{x}_3^{(r)}\underline{p}_2^{(r)}),\ \cdots\qquad[31.3]$$

角动量算符是为了描述波函数在坐标系转动下的变换性质,而纯形式地引入波动力学中的. 根据转动群的运动学性质,能给

出下列与$\underline{P}$的具体形式[31.3]无关的更普遍的对易关系:

$$[\underline{P}_k, \underline{C}]=0 \qquad (k=1,2,3), \qquad [31.4]$$

$$\left.\begin{aligned}&[\underline{P}_1, \underline{A}_1]=0, \cdots\\&[\underline{P}_1, \underline{A}_2]=-[\underline{P}_2, \underline{A}_1]=i\underline{A}_3, \cdots\end{aligned}\right\} \qquad [31.5]$$

式中$\underline{C}$为$\underline{P}^{(r)}$和$\underline{x}^{(r)}$的标量函数，而$\underline{A}_k$为矢量$\underline{A}(\underline{P}^{(r)}, \underline{x}^{(r)})$的第$k$个分量. 例如，我们可以取$\underline{C}=\underline{H}$(哈密顿算符)，$\underline{C}=|\underline{P}|^2$，$\underline{A}=\underline{x}^{(r)}$. 根据这些关系，用纯代数运算便能导出一般算符$\underline{P}$的本征值和矩阵元①.

当然，我们也能通过用球极坐标表示微分算符[31.1]而解析地处理(参见关于本论题的习题，§45). 我们看到，本征值方程

$$\underline{P}^2Y=\lambda Y \qquad [31.6]$$

与球函数$Y_l(\theta, \varphi)$所满足的方程[18.9]相同. 因此，$\underline{P}^2$具有本征值

$$\lambda=l(l+1) \qquad (l=0,1,2,\cdots). \qquad [31.7]$$

若我们进一步来选取$2l+1$个线性独立的Y_l，使得它们同时是$\underline{P}_3$的本征函数(这是可能的，因为，根据[31.4]式，$\underline{P}^2$与$\underline{P}_k$对易)

$$\underline{P}_3Y_l=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_l=\mu Y_l,$$

于是，我们得到球谐函数$Y_{l,m}$(参见[18.18]式)，以及本征值

$$\mu=m; \quad m=-l, -l+m, \cdots, +l. \qquad [31.8]$$

§32. 角动量的矩阵元

在此，我们给出角动量算符的矩阵元的概要. 如我们曾经强调过的，这些可以根据对易关系[31.5]用纯代数方法导出.

---

① 例如，参见 M. Born and P. Jordan, *Elementare Quantenmechanik*; P. A. M. Dirac, *Quantum Mechanics*. [中译本: P. A. M. 狄拉克，量子力学原理，陈咸亨译，科学出版社. ——中译者注]

我们现在用 j 来表示量子数 l. 这样做，意味着容许 j 取半整数值的可能性，这与特殊形式[31.1]形成对照，按照[31.6]和[31.7]式，后者只允许 l 取整数值.

这里，我们将具有固定 j 值的矩阵元写成如下形式

$$(j, m'| \,|j, m),$$

式中标记矩阵元的 m 遵从条件 $-j \leqslant m \leqslant +j$. 于是，矩阵具有下列形式①:

$$\begin{array}{c} \\ m=j \\ m=j-1 \\ m=j-2 \\ \vdots \\ m=-j \end{array} \begin{array}{cccc} m=j & m=j-1 & \cdots & m=-j \\ \left\| \begin{array}{l} (j, j \quad |\,|j, j) \\ (j, j-1|\,|j, j) \\ (j, j-2|\,|j, j) \\ \quad\vdots \\ (j, -j|\,|j, j) \end{array} \right. & \begin{array}{l} (j, j \quad |\,|j, j-1) \\ (j, j-1|\,|j, j-1) \\ \quad\cdots \\ \\ \quad\cdots \end{array} & \begin{array}{c} \cdots \\ \cdots \\ \\ \\ \\ \end{array} & \left. \begin{array}{c} \cdots \\ \cdots \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\| . \end{array}$$

在 $\underline{P}^2$ 和 $\underline{P}_3$ 是对角的表象中(如已熟知的，对易算符可以同时对角化)，我们得到

$$(j, m'|\underline{P}^2|j, m) = j(j+1)\delta_{mm'}, \qquad [32.1]$$

$$(j, m'|\underline{P}_3|j, m) = m\delta_{mm'}, \qquad [32.2]$$

而对于非厄密矩阵

$$\underline{P}_1 \pm i\underline{P}_2,$$

我们进一步得到

$$(j, m+1|\underline{P}_1 + i\underline{P}_2|j, m) = (j, m|\underline{P}_1 - i\underline{P}_2|j, m+1)$$
$$= \sqrt{(j-m)(j+1+m)}. \qquad [32.3]$$

---

① 这种表示法意味着，例如，对于 $j=1/2$ 有下列矩阵:

$$\underline{P}_1 + i\underline{P}_2 = \left\| \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{array} \right\|, \quad \underline{P}_1 - i\underline{P}_2 = \left\| \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{array} \right\|, \quad \underline{P}_3 = \frac{1}{2}\left\| \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right\|.$$

对应于这些矩阵，有下列矩阵

$$\underline{P}_1 = \frac{1}{2}\left\| \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{array} \right\|, \quad \underline{P}_2 = \frac{1}{2}\left\| \begin{array}{cc} 0 & -i \\ i & 0 \end{array} \right\|.$$

所有其它矩阵元等于零.

对于每一矢量 $\underline{A}$(特别是，对于坐标矩阵)我们可以从对易关系[31.5]导出下列普遍表达式

$$\left.\begin{aligned}
&(j+1, m\pm 1|\underline{A}_1\pm i\underline{A}_2|j, m) \\
&\qquad = \mp(j+1|\underline{A}|j)\sqrt{(j\pm m+2)(j\pm m+1)} \\
&(j+1, m|\underline{A}_3|j, m) = (j+1|\underline{A}|j)\sqrt{(j+m+1)(j-m+1)} \\
&(j, m\pm 1|\underline{A}_1\pm i\underline{A}_2|j, m) = (j|\underline{A}|j)\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)} \\
&(j, m|\underline{A}_3|j, m) = (j|\underline{A}|j)m \\
&(j-1, m\pm 1|\underline{A}_1\pm i\underline{A}_2|j, m) \\
&\qquad = \pm(j-1|\underline{A}|j)\sqrt{(j\mp m)(j\mp m-1)} \\
&(j-1, m|\underline{A}_3|j, m) = (j-1|\underline{A}|j)\sqrt{(j+m)(j-m)}
\end{aligned}\right\} \tag{32.4}$$

对于初态和终态中的所有其它各对 j, m 值，矩阵元都等于零．表达式 $(j'|\underline{A}|j'')$ 是与 m 无关的一些数．

§33. 自旋

为了说明实验的观察结果(首先关于反常塞曼分裂)给自由电子加上了自旋[A-3][①]．利用角动量的一般表象[32.1], [32.2]和[32.3]式，可以将上述事实包括在理论中．这一表象的确并不以特殊定义 [31.3] 式为根据 ([31.3]式不能应用于自旋) 而是仅仅以关系式[31.5]为基础．基于此，可能以纯形式的方法将自旋引进理论中[②]．在电子的相对论性论述中(狄拉克方程)，证明了本节所讨论的自旋形式体系已被包含在方程式中，而且在小速度的极限情况变得明显了[③]．

① G. E. Uhlenbeck and S. Goudsmit, *Naturwiss.* **13**, 953(1925); *Nature* **117**, 264(1926).

② W. Pauli, *Z. Physik* **43**, 601(1927).

③ P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* (*London*) **A117**, 610(1928); **A 118**, 351(1928).

现在我们想要考虑具有自旋的粒子的普遍化的描述. 关于粒子的自旋 s, 我们总是指始终具有固定大小(与其分量相反)的角动量而言. 我们用 $\underline{s}_k$ 表示自旋算符. 于是, 例如, 与[31.5]式相似的对易关系成立:

$$\underline{s}_1\underline{s}_2-\underline{s}_2\underline{s}_1=i\underline{s}_3,\ \cdots \qquad [33.1]$$

(循环交换指标).

由于我们认为 $|\mathbf{s}|^2$ 是一固定数, 根据[32.1]式, 它必定具有如下形式

$$|\underline{s}|^2=\underline{s}_1^2+\underline{s}_2^2+\underline{s}_3^2=s(s+1),$$

式中 s 为半整数或整数, 我们可以将分量之一 s_k, 例如 s_3, 作为新的独立变量引进波函数中: $\psi=\psi(q, s_3, t)$. 然而, 由于 s_3 只能取 $-s, \cdots, +s$ 等值(参见[32.2]式), 因此我们也能写成

$$\psi(q, s_3, t)=\sum_{\mu}C_{\mu}(s_3)\psi_{\mu}(q, t) \quad (-s\leqslant\mu\leqslant s), \qquad [33.2]$$

例如, 式中 $C_{\mu}(s_3)$ 由下式定义

$$C_{\mu}(s_3)=\begin{cases}1, & s_3=\mu,\\ 0, & s_3\neq\mu,\end{cases} \qquad [33.3]$$

并满足正交性关系

$$\sum_{s_3=-s}^{+s}C_{\mu}^*(s_3)\cdot C_{\mu'}(s_3)=\begin{cases}1, & \mu=\mu'\\ 0, & \mu\neq\mu'.\end{cases} \qquad [33.4]$$

算符 $\underline{s}_k$ 对波函数的作用在矩阵表示法

$$\underline{s}_k\cdot\psi_{\mu}(q, t)=\sum_{\mu'}\psi_{\mu'}(\mu'|\underline{s}_k|\mu) \qquad [33.5]$$

中最易看出, 式中矩阵元由下式给出(参见[32.3]式)

$$\left.\begin{aligned}&(\mu\pm1|\underline{s}_1\pm\underline{s}_2|\mu)=\sqrt{(s\mp\mu)(s+1\pm\mu)}\\&(\mu|\underline{s}_3|\mu)=\mu\end{aligned}\right\}. \qquad [33.6]$$

因此, 例如, 我们有

$$\underline{s}_3 \cdot \psi_\mu = \psi_\mu \cdot \mu,$$

$$\begin{aligned}\underline{s}_1 \cdot \psi_\mu &= \frac{1}{2}(\underline{s}_1 + i\underline{s}_2)\psi_\mu + \frac{1}{2}(\underline{s}_1 - i\underline{s}_2)\psi_\mu \\ &= \frac{1}{2}\psi_{\mu-1}\sqrt{(s+\mu)(s+1-\mu)} \\ &\quad + \frac{1}{2}\psi_{\mu+1}\sqrt{(s-\mu)(s+1+\mu)},\end{aligned}$$

式中对于 $\mu=-s$, 第一项等于零, 对于 $\mu=s$, 第二项等于零.

这一形式体系的最重要和最基本的应用是对电子的自旋. 由于

$$s=\frac{1}{2}, \text{这意味着 } \mu=-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, \qquad [33.7]$$

因此一切都特别简单:

$$|\underline{s}|^2 = \underline{s}_1^2 + \underline{s}_2^2 + \underline{s}_3^2 = s(s+1) = \frac{3}{4},$$

$$\underline{s}_1 + i\underline{s}_2 = \begin{Vmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{Vmatrix}, \quad \underline{s}_1 - i\underline{s}_2 = \begin{Vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{Vmatrix}, \quad \underline{s}_3 = \begin{Vmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{Vmatrix}.$$

采用由下式定义的新算符

$$\sigma = 2\underline{s}, \qquad [33.8]$$

我们得到①

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = I = \begin{Vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{Vmatrix}, \qquad [33.9]$$

$$\sigma_1 = \begin{Vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{Vmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{Vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{Vmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{Vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{Vmatrix}. \qquad [33.10]$$

这些算符遵从对易关系

$$[\sigma_1, \sigma_2] = \sigma_1\sigma_2 - \sigma_2\sigma_1 = 2i\sigma_3, \cdots \qquad [33.11]$$

① 矩阵 σ_1, σ_2 和 σ_3 称为泡利矩阵[学生注]。

(循环交换指标).

此外，它们还满足下列诸关系

$$\sigma_1\sigma_2=-\sigma_2\sigma_1=i\sigma_3, \cdots$$

(循环交换指标)

或 $$\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_1\equiv[\sigma_1, \sigma_2]_+\equiv 0, \cdots \qquad [33.12]$$

(循环交换指标).

由于最后这些关系，σ_k 称为反对易的.

现在，除位置坐标和时间外，电子的波函数也要包含分立的自旋变量 s_3; 自旋变量代表自旋电子(spinning electron)的附加自由度. 对应于两个本征值 $s_3=+1/2$ 和 $-1/2$, 象在[33.2]式中那样，我们将 ψ 分成两项 ψ_1 和 ψ_2, 并写成

$$\psi(q, s_3; t)=\begin{Vmatrix}\psi_1(q; t)\\ \psi_2(q; t)\end{Vmatrix}. \qquad [33.13]$$

归一化条件为

$$\int\psi^*\psi \mathrm{d}V=\int|\psi_1|^2\mathrm{d}V+\int|\psi_2|^2\mathrm{d}V=1,$$

式中 $|\psi_1|^2\mathrm{d}V$ 和 $|\psi_2|^2\mathrm{d}V$ 可想象为电子分别具有平行于或反平行于正 z 方向的自旋的几率.

显然，这一形式体系能够直接应用于波动力学的通常计算方法(变换理论，微扰理论，等等.)一般地，除 $\underline{p}$ 和 $\underline{q}$ 以外，哈密顿函数也要包含 $\underline{s}_k$; 例如，若存在磁场 H, 哈密顿算符将包括一附加项，它等于常数乘

$$\underline{s}_1H_1+\underline{s}_2H_2+\underline{s}_3H_3.$$

可以直接将这一形式体系推广到 N 个具有自旋的粒子的系统. 此时波函数也包含 N 个粒子的每一个自旋变量 $s_3^{(\alpha)}$ $(\alpha=1, \cdots, N)$, 这里 $s_3^{(\alpha)}$ 取 $-s^{(\alpha)}, \cdots, +s^{(\alpha)}$ 诸值之一. 对于一个电子，我们只有 $s_3^{(\alpha)}=\pm 1/2$. 可以定义总角动量为

$$\underline{J}=\sum_{a=1}^{N}\{(\underline{x}^{a}\times\underline{p}^{(a)})+h\underline{s}^{(a)}\},$$

它遵从通常的对易关系式[31.5].

§34. 旋量和空间转动

这里我们要来研究，已给出的自旋形式体系相对于空间转动如何表现.

为此目的，我们考察一个 2×2 幺正矩阵 $\underline{S}$，对此我们特别要求

$$\det\underline{S}=1,$$

（根据幺正性，$\underline{S}\underline{S}^{+}=1$，只能导出 $|\det\underline{S}|^{2}=1$；即，在 $\det\underline{S}=e^{i\alpha}$ 中有一个未定的、无关重要的相因数，其中 α 是实数.）

$$\underline{S}=\begin{Vmatrix}S_{11} & S_{12}\\ S_{21} & S_{22}\end{Vmatrix},\ \det\underline{S}=S_{11}S_{22}-S_{12}S_{21}=1. \qquad [34.1]$$

根据条件

$$\underline{S}^{-1}=\underline{S}^{+},\ 以及\ \underline{S}^{-1}=\begin{Vmatrix}S_{22} & -S_{12}\\ -S_{21} & S_{11}\end{Vmatrix}, \qquad [34.2]$$

于是我们得到

$$S_{22}=S_{11}^{*},\quad S_{21}=-S_{12}^{*};\quad |S_{11}|^{2}+|S_{12}|^{2}=1.$$

我们可以用这些结果写出

$$\underline{S}=\begin{Vmatrix}S_{11} & S_{12}\\ -S_{12}^{*} & S_{11}^{*}\end{Vmatrix}. \qquad [34.3]$$

我们将证明，由矩阵 $\underline{S}$ 表示的变换为一转动．空间转动的这一表示在量子力学之前就已为人所知①．例如，矩阵 $\underline{S}$ 可写成三个欧勒角(图 34.1)的函数：

---

① 参见 F. Klein and A. Sommerfeld, *Über die Theorie des kreissels.*

$$S_{11}=\cos\frac{\vartheta}{2}\exp\left[\frac{i}{2}(\varphi+\chi)\right]$$
$$S_{12}=i\sin\frac{\vartheta}{2}\exp\left[\frac{i}{2}(\varphi-\chi)\right] \quad [34.4]$$

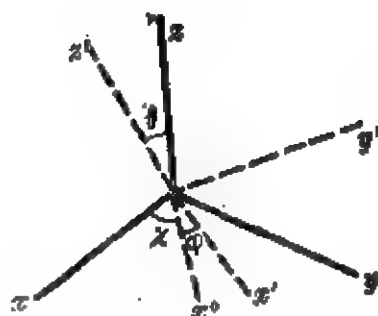


图 34.1

现在我们引入一个二分量数学型

$$\xi=\|\xi_1, \xi_2\|, \quad [34.5]$$

厄任费斯脱称之为旋量，它被$\underline{S}$变换如下：

$$\xi'=\xi\cdot\underline{S}, \quad \left.\begin{aligned}\xi_1'&=\xi_1S_{11}+\xi_2S_{21}=\xi_1S_{11}-\xi_2S_{12}^*\\ \xi_2'&=\xi_1S_{12}+\xi_2S_{22}=\xi_1S_{12}+\xi_2S_{11}^*\end{aligned}\right\}. \quad [34.6]$$

我们看到，我们的二分量波函数[33.13]

$$\psi=\begin{Vmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{Vmatrix} \quad [34.7]$$

相对于空间转动对ξ反步地变换①：

$$\psi'=\underline{S}^{-1}\cdot\psi, \quad \left.\begin{aligned}\psi_1'&=S_{22}\psi_1-S_{12}\psi_2=S_{11}^*\psi_1-S_{12}\psi_2\\ \psi_2'&=-S_{21}\psi_1+S_{11}\psi_2=S_{12}^*\psi_1+S_{11}\psi_2\end{aligned}\right\}. \quad [34.8]$$

我们注意，$\|\xi_1^*, \xi_2^*\|$象$\|\xi_2, -\xi_1\|$那样变换，而且

$$\begin{Vmatrix}\psi_1^*\\ \psi_2^*\end{Vmatrix}\text{象}\begin{Vmatrix}\psi_2\\ -\psi_1\end{Vmatrix}\text{那样变换；}$$

即，若作如下代换：

$$\left.\begin{aligned}\xi_1^*&\to\xi_2 \qquad & \psi_1^*&\to\psi_2\\ \xi_2^*&\to-\xi_1 \qquad & \psi_2^*&\to\psi_1\end{aligned}\right\}, \quad [34.9]$$

上述公式仍然成立。

现在，我们进行一个重要的考察：每一幺正变换（包括我们的$\underline{S}$），保持型

$$N=(\xi\xi^*)=\xi_1\xi_1^*+\xi_2\xi_2^* \quad [34.10]$$

或

① ψ相对于ξ的反步本性由型$(\xi\psi)$的不变性所表征。

$$\rho=(\psi^*\psi)=\psi_1^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2 \qquad [34.11]$$

不变. 这可通过代换 $\xi'=\xi\underline{S}$ 和 $\xi'^*=\underline{S}^+\xi^*$ 直接验证. 反之, 可以说, 基于理论的物理意义的这一要求, 同单模性($\det\underline{S}=1$)和线性的要求一起, 决定我们的特殊变换矩阵 $\underline{S}$ 的型.

现在, 我们要来证明: 变换 $\underline{S}$ 实际上表示一个转动. 我们引入两个矢量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{d}$($\boldsymbol{d}$ 称为自旋密度)与矢量 $\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$ (参见[33.10]式)相联系:

$$\boldsymbol{x}=(\xi\boldsymbol{\sigma}\xi^*), \boldsymbol{d}=(\psi^*\boldsymbol{\sigma}\psi). \qquad [34.12]$$

这一表示法表明, 例如,

$$\boldsymbol{x}=\sum_{\alpha=1,2}\sum_{\beta=1,2}\xi_\alpha\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\xi_\beta^*.$$

利用

$$\sigma_1+i\sigma_2=2\begin{Vmatrix}0&1\\0&0\end{Vmatrix}, \quad \sigma_1-i\sigma_2=2\begin{Vmatrix}0&0\\1&0\end{Vmatrix},$$

我们得到

$$\left.\begin{array}{ll} x_1+ix_2=2\xi_1\xi_2^* & d_1+id_2=2\psi_1^*\psi_2 \\ x-ix_2=2\xi_2\xi_1^* & d_1-id_2=2\psi_2^*\psi_1 \\ x_3=\xi_1\xi_1^*-\xi_2\xi_2^* & d_3=\psi_1^*\psi_1-\psi_2^*\psi_2 \end{array}\right\}. \qquad [34.13]$$

现在我们问: 当我们用 $\underline{S}$ 变换 ξ 和 ψ 时, $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{d}$ 如何变换. 为了回答这个问题, 我们计算下面的表达式

$$x_1^2+x_2^2+x_3^2=(x_1+ix_2)(x_1-ix_2)+x_3^2.$$

利用[34.13]和[34.10]两式, 我们立即得到

$$x_1^2+x_2^2+x_3^2=N^2=\text{常数}. \qquad [34.14]$$

同理, 我们得到

$$d_1^2+d_2^2+d_3^2=\rho^2=\text{常数}. \qquad [34.15]$$

于是, 由于 $\underline{S}$ 保持型 $|\boldsymbol{x}|^2$ 和 $|\boldsymbol{d}|^2$ 不变, 所以我们已证明: 当 $\underline{S}$ 作用于 ξ 和 ψ 时, 它将引起一个转动. 在两种情况中, 我们得到完全相

同的转动. 由于这种转动的线性变换性质, 我们也能写成

$$x'_i = \sum_k x_k A_{ki}, \quad d'_i = \sum_k d_k A_{ki}. \qquad [34.16]$$

利用[34.6], [34.8]和[34.12]三式, 我们立刻得到

$$\underline{S}\sigma_i \underline{S}^{-1} = \sum_k \sigma_k A_{ki}. \qquad [34.17]$$

借助于[34.17]式, 把按照[34.4]式由三个实参数表征的$\underline{S}$变换与转动$\underline{A}$联系起来

$$\underline{S} \to \underline{A}. \qquad [34.18]$$

由[34.17]式的形式可见, 相反的联系是双值的:

$$\underline{A} \to \underline{S},$$
$$\underline{A} \to -\underline{S}.$$

例如, 若 ξ_1 和 ξ_2 都改变符号(即, $\underline{S} = -1$), 则 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{d}$ 不变:

$$\xi' = -\xi, \quad \boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x}; \quad \psi' = -\psi, \quad \boldsymbol{d}' = \boldsymbol{d}.$$

若

$$\underline{S}_{\rm I} \to \underline{A}, \quad \underline{S}_{\rm II} \to \underline{B},$$

则在矩阵乘法的意义上,

$$\underline{S}_{\rm I}\underline{S}_{\rm II} \to \underline{AB}.$$

我们借助于[34.17]式来证明这一点:

$$\underline{S}_{\rm I}\sigma_i \underline{S}_{\rm I}^{-1} = \sum_k \sigma_k A_{ki},$$

$$\underline{S}_{\rm II}\sigma_i \underline{S}_{\rm II}^{-1} = \sum_k \sigma_k B_{ki},$$

$$\underline{S}_{\rm I}(\underline{S}_{\rm II}\sigma_i \underline{S}_{\rm II}^{-1})\underline{S}_{\rm I}^{-1} = \sum_k \underline{S}_{\rm I}\sigma_k \underline{S}_{\rm I}^{-1} B_{ki} = \sum_l \sigma_l (\underline{AB})_{li}$$

此外, 我们回顾下列规则

$$(\underline{S}_{\rm I}\underline{S}_{\rm II})^{+} = \underline{S}_{\rm II}^{+}\underline{S}_{\rm I}^{+}, \quad (\underline{S}_{\rm I}\underline{S}_{\rm II})^{+}\underline{S}_{\rm I}\underline{S}_{\rm II} = 1.$$

这节的内容与群论非常密切地联系着, 我们在此不能对后者

加以介绍．有一些详细论述波动力学与群论的关系的教科书①；为了较深入地学习这一课题，必须参考这些书籍．

注：去掉 $\underline{S}$ 是幺正的限制(但保留 $\det \underline{S}=1$ 的要求)，则上述见解可推广到洛伦兹群②；用这种方法我们得到相对论性自旋理论．

---

① B. L. van der Waerden, *Die Gruppentheoretische Methode in der Quantenmechanik*; H. Weyl, *Group Theory and Quantum Mechanics*; E. P. Wigner, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*; W. Pauli, *Continuous Groups in Quantum Mechanics*, CERN, 1956.

② 这是洛伦兹变换群，熟知它由型

$$x^2+y^2+z^2-c^2t^2$$

的不变性所表征．

第十章　具有自旋的全同粒子

§ 35. 对称性的类别

我们首先考虑用上标(1)和(2)标记的两个全同粒子. 因为粒子是全同的,所以它们的哈密顿算符必定是对称的(即, 在粒子交换下不变). 例如, 对于在核的库仑场和附加的磁场中的两个电子,我们有

$$\underline{H}=\frac{\underline{p}^{(1)2}}{2m}+\frac{\underline{p}^{(2)2}}{2m}-\frac{Ze^2}{r^{(1)}}-\frac{Ze^2}{r^{(2)}}+\frac{e^2}{r_{12}}$$

$$+\mu_0\boldsymbol{H}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)});\quad \mu_0=\frac{eh}{2mc}. \qquad [35.1]$$

令

$$\psi_{\mathrm{I}}=\psi(\boldsymbol{x}^{(1)},s_3^{(1)};\boldsymbol{x}^{(2)},s_3^{(2)}) \qquad [35.2]$$

为这一哈密顿算符的波动方程的一个解. 根据哈密顿算符的对称性,直接得到另一解

$$\psi_{\mathrm{II}}=\psi(\boldsymbol{x}^{(2)},s_3^{(2)};\boldsymbol{x}^{(1)},s_3^{(1)})=P_{12}\psi_{\mathrm{I}}, \qquad [35.3]$$

式中 P_{12} 为交换两个粒子的算符(交换算符). 线性组合

$$\left.\begin{array}{l}\psi_s=\psi_{\mathrm{I}}+\psi_{\mathrm{II}}\\ P_{12}\psi_s=\psi_s\end{array}\right\}(\text{对称解}), \qquad [35.4]$$

$$\left.\begin{array}{l}\psi_a=\psi_{\mathrm{I}}-\psi_{\mathrm{II}}\\ P_{12}\psi_a=-\psi_a\end{array}\right\}(\text{反对称解}) \qquad [35.5]$$

具有重要的性质: 对称解和反对称解之间的矩阵元

$$(a|\underline{H}|s)=\iint\sum_{s_3^{(1)},\,s_3^{(2)}}\psi_a^*\underline{H}\psi_s\mathrm{d}^3x^{(1)}\mathrm{d}^3x^{(2)} \qquad [35.6]$$

总是严格地等于零．我们若交换方程中的粒子，则左端并不改变（H的对称性！），而右端改变符号；因此，我们必定有

$$(a|\underline{H}|s)=0. \qquad [35.7]$$

所以，一个对称解绝不会变成一个反对称解，反之亦然，这就是说，有两类不同的粒子，对于任一相互作用，两类粒子之间的转变都是不可能的①：

$$\left.\begin{array}{lll}\text{对称粒子} & \text{玻色子，} & \text{整数自旋}\\ \text{反对称粒子} & \text{费密子，} & \text{半整数自旋}\end{array}\right\}. \qquad [35.8]$$

若有两个以上的粒子（$N>2$），则能用群论的表示方法证明，存在一类对所有的粒子是对称的解，和一类对所有的粒子是反对称的解：

$$P\psi_s(\boldsymbol{x}^{(1)}, s_3^{(1)};\cdots;\boldsymbol{x}^{(N)}, s_3^{(N)})$$
$$=\psi_s(\boldsymbol{x}^{(1)}, s_3^{(1)};\cdots;\boldsymbol{x}^{(N)}, s_3^{(N)}), \qquad [35.9]$$
$$P\psi_a(\boldsymbol{x}^{(1)}, s_3^{(1)};\cdots;\boldsymbol{x}^{(N)}, s_3^{(N)})$$
$$=\varepsilon_P\psi_a(\boldsymbol{x}^{(1)}, s_3^{(1)};\cdots;\boldsymbol{x}^{(N)}, s_3^{(N)}), \qquad [35.10]$$

式中P为一任意交换，以及

$\varepsilon_P=+1$，P为偶数次，

$\varepsilon_P=-1$，P为奇数次（例如，对于两粒子的一次交换）．

此外，还有与以上所述不同的其他类对称性，在这些对称性中，不能将它们从N扩充到$N+1$．当然，若一个另外的粒子与原已存在的那些粒子（例如，在原子中）碰撞，则两类粒子间的转变是可能的．所以，或者只能存在所有各类的混合，或者只能存在对称的和（或）反对称的类别．实验表明，自然界奇怪地不利用第一种可能性：迄今仅已发现玻色子和费密子．

---

① 费密子和玻色子的名称与下述事实相关：具有半整数自旋的粒子遵从费密统计，而具有整数自旋的粒子遵从玻色统计．参见 W. Pauli，*Phys. Rev.* 58，716 (1940)．

§ 36. 不相容原理

现在我们要比较精确地研究玻色子和费密子的性质. 为此，我们考察在一级近似下是孤立的粒子；即，我们略去粒子间的相互作用.

让我们再从处于态 n_1 和 n_2 的两个无耦合的粒子着手，并把它们所属的本征函数写成

$$u_{n_1}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) \text{和} u_{n_2}(x^{(2)}, s_3^{(2)}).$$

我们知道，无耦合的粒子的波函数是个别波函数的积.

$$u_s = \{u_{n_1}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) \cdot u_{n_2}(x^{(2)}, s_3^{(2)}) + u_{n_2}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) \cdot u_{n_1}(x^{(2)}, s_3^{(2)})\} \cdot C_{n_1 n_2}, \qquad [36.1]$$

$$u_a = \{u_{n_1}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) \cdot u_{n_2}(x^{(2)}, s_3^{(2)}) - u_{n_2}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) \cdot u_{n_1}(x^{(2)}, s_3^{(2)})\} \cdot C_{n_1 n_2}, \qquad [36.2]$$

$$C_{n_1 n_2} = \begin{cases} 1/2, & n_1 = n_2, \\ 1/\sqrt{2} & n_1 \neq n_2. \end{cases} \qquad [36.3]$$

若两函数是全同的，我们由此得到

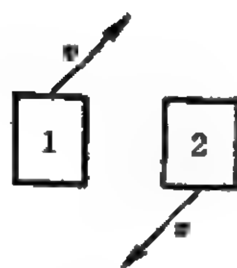
$$u_s = u_{n_1}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) \cdot u_{n_2}(x^{(2)}, s_3^{(2)}), \qquad [36.4]$$

$$u_a \equiv 0. \qquad [36.5]$$

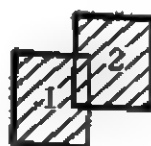
对于费密子来说，两个粒子都处于同一个态的状态绝不存在；这正是**不相容原理**的预见，甚至在波动力学创建之前就已对电子提出这个原理了①. 现在我们知道，它对所有其它费密子(例如，质子和中子)也都成立.

从对不相容原理的肤浅考虑，可能会认为，正在提出一种超距作用，由于这种超距作用，使得甚至遥远分开的粒子也彼此了解("订了契约"). 然而，并非如此，因为只当两个粒子的波包重叠

① W. Pauli, Z. *Physik* 31, 765(1925).



分离的波包.
可个别追踪的粒子.
不相容原理无效.



重叠的波包.
不能个别追踪的粒子.
不相容原理有效.

图 36.1

(图 36.1)时不相容原理才有效. 若波包不重叠, 则在空间各处我们都得到

$$u_{n_1}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) \cdot u_{n_2}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) \equiv 0, \qquad [36.6]$$

或, 对非定态,

$$u(x^{(1)}, s_3^{(1)}, t) \cdot v(x^{(1)}, s_3^{(1)}, t) = 0. \qquad [36.7]$$

在那种情况中, 由于根据 [36.6] 式, 只当 $u_{n_1}=0$ 时我们才能有 $u_{n_1}=u_{n_2}$, 所以上面的对称化是不重要的.

推广到多粒子时只需组合地计算. 在对称化时, 我们必须对所有 $N!$ 个排列求和:

$$u_s = c \cdot \sum_P P\{u_{n_i}(x^{(j)}, s_3^{(j)})\}, \quad i, j = 1, 2, \cdots, N, \qquad [36.8]$$

$$u_a = c \cdot \sum_P \varepsilon_P P\{u_{n_i}(x^{(j)}, s_3^{(j)})\}$$

$$= c \cdot \begin{vmatrix} u_{n_1}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) & u_{n_1}(x^{(2)}, s_3^{(2)}) & \cdots & u_{n_1}(x^{(N)}, s_3^{(N)}) \\ u_{n_2}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & & & \\ u_{n_N}(x^{(1)}, s_3^{(1)}) & \cdots & \cdots & u_{n_N}(x^{(N)}, s_3^{(N)}) \end{vmatrix}. \qquad [36.9]$$

若函数 u_{n_i} 中的任何两个函数相等, 则这一行列式恒等于零. 这又正好是波函数重叠的任意多个费密子的不相容原理的内容.

§ 37. 氦原子

我们获得与下述假设极其接近的氦光谱：哈密顿算符是两项之和，一项对空间坐标是对称的，另一项对自旋坐标是对称的. 自旋-轨道相互作用小于库仑相互作用的这种情况也称为罗素-桑德斯耦合.

让我们首先单独考虑两个电子的自旋. 我们取自旋波函数(参见[33.3]式)

$$\left.\begin{aligned} C_+(s_3)&=\begin{cases}1, & s_3=+\dfrac{1}{2}\\[2ex] 0, & s_3=-\dfrac{1}{2}\end{cases}\\ C_-(s_3)&=\begin{cases}0, & s_3=+\dfrac{1}{2}\\[2ex] 1, & s_3=-\dfrac{1}{2}\end{cases}\end{aligned}\right\}. \qquad [37.1]$$

由这些波函数我们只能构成一个反对称组合：

$$C^a(s_3^{(1)},s_3^{(2)})=\frac{1}{\sqrt{2}}(C_+(s_3^{(1)})\cdot C_-(s_3^{(2)})-C_-(s_3^{(1)})\cdot C_+(s_3^{(2)})). \qquad [37.2]$$

利用[33.5]和[33.8]式不难证明

$$(\sigma_3^{(1)}+\sigma_3^{(2)})\cdot C^a(s_3^{(1)},s_3^{(2)})\equiv 0. \qquad [37.3]$$

于是，我们只得到一个本征值(即 0)；反对称态为单态.

另一方面，对于构成对称组合，我们有三种可能性：

$$\left.\begin{aligned} C_1^s(s_3^{(1)},s_3^{(2)})&=C_+(s_3^{(1)})\cdot C_+(s_3^{(2)})\\ C_0^s(s_3^{(1)},s_3^{(2)})&=\frac{1}{\sqrt{2}}[C_+(s_3^{(1)})\cdot C_-(s_3^{(2)})+C_-(s_3^{(1)})\cdot C_+(s_3^{(2)})]\\ C_{-1}^s(s_3^{(1)},s_3^{(2)})&=C_-(s_3^{(1)})\cdot C_-(s_3^{(2)})\end{aligned}\right\}. \qquad [37.4]$$

对于这些组合，下列关系式成立：

$$\left.\begin{aligned}&\frac{1}{2}(\sigma_3^{(1)}+\sigma_3^{(2)})C_1^s=1\cdot C_1^s, && m_s=1\\ &\frac{1}{2}(\sigma_3^{(1)}+\sigma_3^{(2)})C_0^s=0, && m_s=0\\ &\frac{1}{2}(\sigma_3^{(1)}+\sigma_3^{(2)})C_{-1}^s=(-1)\cdot C_{-1}^s; && m_s=-1\end{aligned}\right\}. \qquad [37.5]$$

即，对称态是三重态．我们已用总自旋的 s_3 分量的量子数 m_s 来表征三个三重态．我们也得到

$$\left\{\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)})\right\}^2 C_{m_s}^s=\frac{1}{2}\{3+\boldsymbol{\sigma}^{(1)}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\}C_{m_s}^s=2C_{m_s}^s. \qquad [37.6]$$

现在，我们必须将自旋本征函数的对称性的类别与空间函数的对称性的类别

$$u^s=\frac{1}{\sqrt{2}}\{u(\boldsymbol{x}^{(1)})\cdot v(\boldsymbol{x}^{(2)})+u(\boldsymbol{x}^{(2)})\cdot v(\boldsymbol{x}^{(1)})\}, \qquad [37.7]$$

$$u^a=\frac{1}{\sqrt{2}}\{u(\boldsymbol{x}^{(1)})\cdot v(\boldsymbol{x}^{(2)})-u(\boldsymbol{x}^{(2)})\cdot v(\boldsymbol{x}^{(1)})\} \qquad [37.8]$$

正确地组合起来．电子（费密子！）的总波函数必须是反对称的（相对于空间和自旋的同时交换）．为了做到这点，有两种可能性：

$$\left.U^a(\boldsymbol{x}^{(1)}, s_3^{(1)}; \boldsymbol{x}^{(2)}, s_3^{(2)})=u^s(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)})\cdot C^a(s_3^{(1)}, s_3^{(2)})\quad \text{单态}\right\}, \qquad [37.9]$$

$$\left.\begin{aligned}&V^a(\boldsymbol{x}^{(1)}, s_3^{(1)}; \boldsymbol{x}^{(2)}, s_3^{(2)})=u^a(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)})\cdot C_{m_s}^s(s_3^{(1)}, s_3^{(2)})\\ &\qquad\qquad \text{三重态}\\ &\qquad m_s=+1, 0, -1\end{aligned}\right\}. \qquad [37.10]$$

因此，氦原子的态分成两类：

单态：仲氦，

三重态：正氦.

在基态，

$$u=v, \text{所以 } u^a=0, \text{或 } V^a=0, \tag{37.11}$$

这意味着，只有一个单态项.

在这里所考虑的近似中，哈密顿算符只对空间坐标是对称的，由[35.7]式得知，正态和仲态不能组合. 这是波动力学的典型结果，是先前所不能理解的.

为了确定能量的本征值，我们将两电子间的库仑相互作用

$$V(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)})=V(\boldsymbol{x}^{(2)}, \boldsymbol{x}^{(1)})=\frac{e^2}{r_{12}} \tag{37.12}$$

看作微扰(精确解尚未求得). 利用库仑积分

$$J_0=\int|u(\boldsymbol{x}^{(1)})|^2|v(\boldsymbol{x}^{(2)})|^2 V(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}) \mathrm{d}^3 x^{(1)} \mathrm{d}^3 x^{(2)} \tag{37.13}$$

和交换积分①

---

① 电子交换的频率与交换积分的联系如下：
我们若考虑态

$$u(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, t=0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(u^s(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)})+u^a(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)})),$$

在时刻 t 我们有

$$u(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{u^s(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E^s \cdot t\right]\right.$$
$$\left.+u^a(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E^a \cdot t\right]\right\}.$$

利用

$$E^s=E^a+2J_1$$

我们得到

$$u(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{u^s(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}) \exp\left[-\frac{2i}{\hbar} J_1 t\right]\right.$$
$$\left.+u^a(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)})\right\} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E^a \cdot t\right],$$

由此导出

$$\left|u\left(\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, t=\frac{\pi\hbar}{2J_1}\right)\right|=\frac{1}{\sqrt{2}}|u^s-u^a|=|u(\boldsymbol{x}^{(2)}, \boldsymbol{x}^{(1)}, t=0)|.$$

电子在时刻 $t=\pi\hbar/2J_1$ 已交换了它们的位置；对应的角频率为

$$\omega=\frac{2J_1}{\hbar}.$$

$$J_1=\int u^*(x^{(1)})\cdot u(x^{(2)})\cdot v(x^{(1)})\cdot v^*(x^{(2)})$$

$$\cdot V(x^{(1)},x^{(2)})\mathrm{d}^3x^{(1)}\mathrm{d}^3x^{(2)}, \qquad [37.14]$$

我们用[29.10]式求得能量本征值有下列移动:

$$\Delta E_{单}=J_0+J_1, \qquad [37.15]$$

$$\Delta E_{三}=J_0-J_1. \qquad [37.16]$$

三重态和单态两项间的差$2J_1$大于自旋-轨道耦合(三重态的裂距);它具有静电能的数量级.

在关于氦光谱的最早期论文中已经可以找到较好的近似①.

§38. 两个全同粒子的碰撞:莫脱理论②

我们来讨论两个全同费密子(电荷e,自旋1/2)的碰撞. 令x为两粒子的相对间距:

$$x=x^{(1)}-x^{(2)}. \qquad [38.1]$$

先前我们计算了被库仑势散射的波函数(例如,参见[19.8]式和§18末尾的注). 所以,在此我们能写出

$$u(x)=P+S\cdot f(\theta) \qquad [38.2]$$

$$P=\exp[ikz+i\gamma\ln k(r-z)], \qquad [38.3]$$

$$S=\frac{1}{r}\exp[ikr-i\gamma\ln kr], \qquad [38.4]$$

$$\gamma=\frac{1}{ka_0}=\frac{e^2}{hv}, \qquad [38.5]$$

$$f(\theta)=-\frac{e^2}{2mv^2\sin^2\frac{1}{2}\theta}\cdot\exp[-i\gamma\ln(1-\cos\theta)-2i\sigma(0,-1/\gamma)]$$

$$[38.6]$$

---

① W. Heisenberg, *Z. Physik* 38, 411(1926)和 39, 499(1927).

② N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc.* (*London*) A 126, 259(1930).

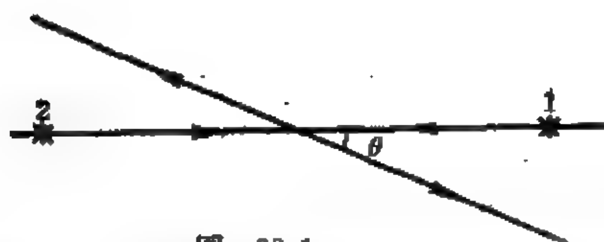


图 38.1

($m=$折合质量). 因为粒子是全同的，我们不能区别 θ 和 $\pi-\theta$ 或 $\boldsymbol{x}$ 和 $-\boldsymbol{x}$. 在经典力学中，我们要将在 θ 角和 $\pi-\theta$ 角处的强度相加；然而，在波动力学中，对于非极化的粒子，我们必须写成

$$W(\boldsymbol{x})=\frac{1}{4}\{\underbrace{3|u(\boldsymbol{x})-u(-\boldsymbol{x})|^2}_{\text{三重态}}+\underbrace{1|u(\boldsymbol{x})+u(-\boldsymbol{x})|^2}_{\text{单态}}\} \qquad [38.7]$$

权重因数 3 起源于对终态电子自旋取向 ($m_s=-1, 0, +1$) 的取和. [38.7]式包含一个波动力学的典型干涉项:

$$W(\boldsymbol{x})=|u(\boldsymbol{x})|^2+|u(-\boldsymbol{x})|^2 -\frac{1}{2}\{u(\boldsymbol{x})u^*(-\boldsymbol{x})+u^*(\boldsymbol{x})u(-\boldsymbol{x})\}.$$

具有反平行自旋取向的粒子碰撞后仍然是可以区别的[A-4].

根据单态和三重态的散射振幅

$$|f(\theta)\pm f(\pi-\theta)|^2=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2 \pm\underbrace{(f(\theta)f^*(\pi-\theta)+f^*(\theta)f(\pi-\theta))}_{\text{干涉项}}, \qquad [38.8]$$

我们求得微分截面为

$$\left.\begin{aligned} dQ&=\frac{1}{4}\{3|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2+|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2\}d\Omega\\ &=\frac{e^4}{4m^2v^4}\left\{\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{\sin^2\frac{1}{2}\theta\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right.\\ &\quad\left.\times\cos\left(\gamma\ln\frac{1-\cos\theta}{1+\cos\theta}\right)\right\}d\Omega \end{aligned}\right\}. \qquad [38.9]$$

在此公式中的干涉项是波动力学的特征．当速度减少时干涉极大紧靠在一起．$\theta=\pi/2$ 是一个特殊情况，在此情况中，公式[38.8]中的四项都相等．

对于两个自旋为零的全同玻色子（例如 α 粒子），[38.7] 和 [38.9]两式应以下两式来代替

$$W(x)=|u(x)+u(-x)|^2$$

和

$$dQ=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2d\Omega.$$

根据[38.8]式，这里也有一个干涉项．

例如，实验上已证明电子、质子和 α 粒子有干涉项；因此，这些粒子的费密子特性和玻色子特性被证实了．

§39. 核自旋的统计法

现在我们将用一个简单而基本的方法来证明：核自旋[A-3]对转动态（例如在双原子气体中）的统计法具有重要的影响．

我们考虑由两个全同原子 X 组成的分子 X_2．这样一个转子（"哑铃"）的本征函数已知为球谐函数（参见 §31），而且其本征值为

$$E_{转}=\frac{\hbar^2}{2A}l(l+1),$$

式中 A 为分子的转动惯量①．对于偶数 l，球谐函数是偶函数：

$$Y_l(\theta,\varphi)=(-1)^lY_l(\theta',\varphi');\quad \theta'=\pi-\theta,\quad \varphi'=\pi+\varphi.$$

对于核自旋为零的情况，我们有玻色统计法，且只出现这些对称态．然而，若核自旋 I 不为零，情况就不同了．一个核自旋 I 具有 $2I+1$ 个取向的可能性 m_I，

① 这些转动态（$l=0,1,2,\cdots$）的间距比分子振动的激发能小得多．所以，一个整个转动能级带属于每一个振动能级，而这就是分子典型的带光谱的原因．

$$-I\leqslant m_I\leqslant +I.$$

所以，分子具有$(2I+1)^2$ 个可能的核自旋态 $m_I^{(1)}$, $m_I^{(2)}$，它们分成三类：

$$\left.\begin{array}{lr} C_{m_I}^{(1)}\cdot C_{m_I}^{(2)} & 2I+1\text{个态} \\ C_{m_I'}^{(1)}\cdot C_{m_I''}^{(2)}+C_{m_I'}^{(2)}\cdot C_{m_I''}^{(1)},\quad m_I'\neq m_I'',\ & I(2I+1)\text{个态} \end{array}\right\}\text{共有}(I+1)(2I+1)\text{个态},$$

$$C_{m_I'}^{(1)}\cdot C_{m_I''}^{(2)}-C_{m_I'}^{(2)}\cdot C_{m_I''}^{(1)},\quad m_I'\neq m_I'',\quad I(2I+1)\text{个态}.$$

如前，我们必须将这些自旋函数与空间函数适当地组合起来：

a. I 为整数，玻色子：(在自旋＋空间中是对称的)

$$Q=\frac{\text{具有偶数 } l \text{ 的态的数目}}{\text{具有奇数 } l \text{ 的态的数目}}=\frac{I+1}{I}.$$

b. I 为半整数，费密子：(在自旋＋空间中是反对称的)

$$Q=\frac{\text{具有偶数 } l \text{ 的态的数目}}{\text{具有奇数 } l \text{ 的态的数目}}=\frac{I}{I+1}.$$

这里 Q 正是谱带中相邻谱线$(l=0,1,2,\cdots)$的强度比，所以，它可根据分子光谱推断出来．根据对 Q 的了解，即能确定 I 的值以及核的对称性．

在历史上，这对确定原子核是由质子和电子所组成，还是由质子和中子所组成起过作用。①

① 参见 W. Pauli, "*Zür älteren und neueren Geschichte des Neutrinos*" *in Aufsätze und Vorträge über Physik und Erkenntnistheorie*(Vieweg, Braunschweig, 1961).

习　　题

§40. 间隔中的基本解

1. 用下述两种方法，确定能在相距为 L 的两平行壁间自由运动的粒子的基本解：

a. 利用本征解

$$\psi_n(x,t)=u_n(x)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n t\right]$$

的适当叠加，并考虑完全性关系

$$\sum_n u_n(x)u_n^*(x')=\delta(x-x').$$

b. 用完全自由粒子的基本解，并用镜象法以满足边界条件.

并证明，用上述两种方法所得到的表达式是完全相同的. 为此，利用由下式定义的 ϑ 函数① 的性质

$$\vartheta_3(z|\tau)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\exp[2niz]\exp[i\pi\tau n^2]$$

$$=1+2\sum_{n=1}^{\infty}\cos 2nz\cdot\exp[i\pi\tau n^2],$$

所需的性质是

$$\vartheta_3(z|\tau)=(-i\tau)^{-\frac{1}{2}}\exp\left[\frac{z^2}{i\pi\tau}\right]\cdot\vartheta_3\left(\frac{z}{\tau}\middle|-\frac{1}{\tau}\right).$$

---

① 参见 E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis* (Cambridge University Press, New York, 1962) pp. 462ff.

2. 利用上部分所求得的基本解 $K(x,x',t)$，并根据

$$\psi(x,t)=\int_0^L dx' f(x')K(x,x',t) \qquad [40.1]$$

来确定波包的运动，假定在 $t=0$ 时波包具有 $f(x)$的形式. 选取由高斯分布

$$f(x-x_0)=(\sigma_0\sqrt{2\pi})^{-\frac{1}{2}}\cdot\exp\left[\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_0^2}+\frac{i}{\hbar}(x-x_0)mv_0\right\}\right]$$

的反射所得到的级数为 $f(x)$.

证明[40.1]式也能由下式表示

$$\psi(x,t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\{\psi_0(2nL+(x-x_0),t)-\psi_0(2nL-(x-x_0),t)\},$$

$$[40.2]$$

式中 $\psi_0(x-x_0,t)$ 为属于初始分布 f 的完全自由粒子的解. 通过把 $P(P(x,t)=\psi\psi^*)$分解为一个经典项

$$P_c=\sum_n\{|\psi_n^+|^2+|\psi_n^-|^2\},$$

和一个干涉项

$$P_i=\sum_n\{\psi_n^+\psi_n^{-*}+\psi_n^+\psi_{n+1}^{-*}+\psi_n^-\psi_n^{+*}+\psi_n^-\psi_{n+1}^{+*}\},$$

用[40.2]式讨论几率分布 $P(x,t)=\psi\psi^*$ 中的干涉. 式中 $\psi_n^\pm$由下式定义

$$\psi_n^\pm\equiv\psi_0(2nL\pm(x-x_0),t).$$

证明，时间不太长时($\sigma_0^2+\hbar^2t^2/4m^2\sigma_0^2\ll L^2$)，其余的项可略去. 此外，用 ϑ_3函数表示 P_c，并借助于第一部分中给出的函数 ϑ_3 的性质，证明 $t\to\infty$ 时 P_c 变成均匀分布 $1/L$[A-5].

§ 41. 束缚态和隧道效应

1. 根据波函数及其一阶导数在势的突变点连续的条件，确定

能量的本征值(束缚态):

a. 对于一维势阱(图 41.1*a*);

b. 对于三维球面对称势阱(图 41.1*b*), 在波函数也是球面对称

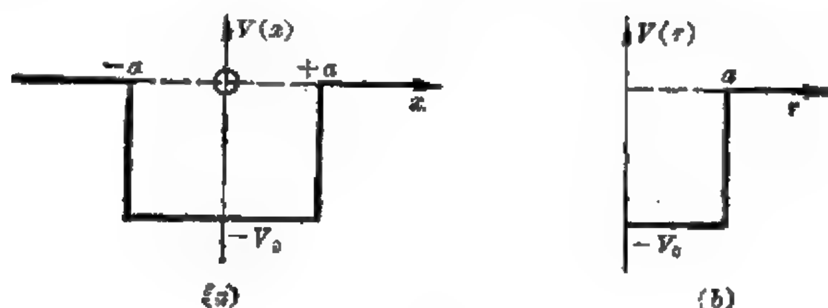


图 41.1

(S 态)的假设下.

讨论作为势阱线度的函数的本征值的数目.

2. 用与第一部分中相同的条件, 计算矩形势垒的透射系数 $|u_2/u_1|^2$ 作为能量 $E(>0)$ 的函数. 这是隧道效应的一个例子(图41.2).

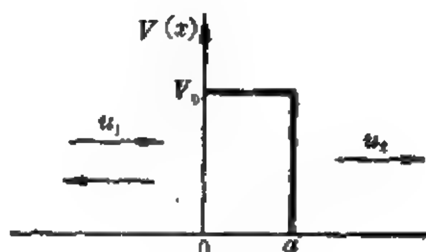


图 41.2

§ 42. 克朗尼格-朋奈势

对周期矩形势(克朗尼格-朋奈势), 推导决定能量本征值 E 的方程. 利用波函数及其一阶导数在势的突变点是连续的条件, 以及周期势的本征函数的下列普遍性质:

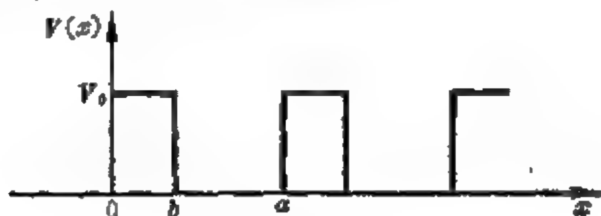


图 42.1

$$\psi(x)=\exp[ikx]u_k(x);\quad u_k(x)\text{是周期的.}$$

讨论在 $b\to 0$, $ab(mV_0/\hbar^2)=P=$常数的极限情况中 $E(k)$的行为.

§ 43. 球谐函数

球面函数 $Y_l(\theta,\varphi)$满足微分方程

$$\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_l}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2 Y_l}{\partial\varphi^2}+l(l+1)Y_l=0,$$

将它乘以 r^l, 则给出 l 次的谐多项式. 它能按 $2l+1$ 个线性独立的函数

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=P_l^m(x)e^{im\varphi}$$

展开, 式中 $x=\cos\theta$ 以及 $-l\leqslant m\leqslant +l$; $Y_{l,m}$ 满足微分方程

$$(1-x^2)y''-2xy'+\left\{l(l+1)-\frac{m^2}{1-x^2}\right\}y=0.$$

对于一给定的 m^2 值只有一个解, 它在 $x=+1$ 和 $x=-1$ 处是有限的.

1. 借助于代换

$$y=(1-x^2)^{m/2}v,$$

并从 $m=\pm l$ 的情况着手, 证明 P_l^m 的微分方程的解为

$$P_m^l(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{(-1)^l}{2^l l!}\,\frac{\mathrm{d}^{m+l}}{\mathrm{d}x^{m+l}}(1-x^2)^l. \tag{43.1}$$

(式中的数值因数是惯用的). 对正和负 m 也都应用这个公式, 证明关系式

$$P_l^m=C_{l,m}P_l^{-m};\ \text{式中}C_{l,m}=(-1)^m\frac{(l+m)!}{(l-m)!}.$$

例如, 可通过比较[43.1]式中 x 的最高幂的系数来证实 $C_{l,m}$ 的值.

2. 从恒等式

$$\frac{d^2}{dx^2}(1-x^2)^{\lambda+1}+2(\lambda+1)\{(2\lambda+1)(1-x^2)^{\lambda}-2\lambda(1-x^2)^{\lambda-1}\}=0,$$

[43.2]

着手(式中 λ 为一任意实数)，通过 $l+m$ 次微分，推导递推公式

$$P_{l+1}^{m+1}-P_{l-1}^{m+1}=(2l+1)\sqrt{1-x^2}P_l^m. \qquad [43.3]$$

应用

$$\frac{d^{l+m+1}}{dx^{l+m+1}}(1-x^2)^{l+1}=-2(l+1)$$

$$\times\left\{x\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(1-x^2)^l+(l+m)\frac{d^{l+m-1}}{dx^{l+m-1}}(1-x^2)^l\right\},$$

验证另一恒等式

$$xP_l^m+(l+m)\sqrt{1-x^2}P_l^{m-1}-P_{l+1}^m=0,$$

应用[43.3]式，上式可变成如下形式

$$(2l+1)xP_l^m=(l-m+1)P_{l+1}^m+(l+m)P_{l-1}^m. \qquad [43.4]$$

3. 计算归一化积分

$$\int_{-1}^{+1}\{P_l^m(x)\}^2dx=N_l^m.$$

为此，根据[43.4]式推导联系 N_{l+1}^m 与 N_l^m 的递推公式．对 $m=l$ 的情况，有一个从[43.2]式导出的附加递推公式．结果为

$$N_l^m=\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\frac{2}{2l+1}. \qquad [43.5]$$

4. 用归一化的球谐函数

$$\overline{Y}_{l,m}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{N_l^m}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

推导其分量为

$$e_1+ie_2=\sin\theta e^{i\varphi} \text{ 和 } e_3=\cos\theta$$

的单位矢 e 的矩阵元

$$(l',m+1|e_1+ie_2|l,m) \text{和} (l',m|e_3|l,m).$$

只当 $l'=l+1$ 或 $l'=l-1$ 时它们才不等于零．

§ 44. 谐振子的基本解

通过对 n 的求和，确定谐振子的闭合式的基本解(这里 $\tau=\omega_0 t$)

$$K(x, x', t)=\sum_n h_n^*(x')h_n(x)\exp\left[-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\tau\right]. \tag{44.1}$$

为此目的，用表达式

$$\exp[-x^2]=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp[-v^2+2ivx]\mathrm{d}v \tag{44.2}$$

是方便的，由此导出厄密多项式

$$\begin{aligned}H_n(x)&=(-1)^n\exp[x^2]\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n\exp[-x^2]\\&=(-1)^n\exp[x^2]\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}(2iv)^n\exp[-v^2+2ivx]\mathrm{d}v;\end{aligned} \tag{44.3}$$

于是，

$$\begin{aligned}h_n(x)=&\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}(-1)^n\exp\left[+\frac{x^2}{2}\right]\frac{1}{\sqrt{\pi}}\\&\times\int_{-\infty}^{+\infty}(2iv)^n\exp[-v^2+2ivx]\mathrm{d}v.\end{aligned} \tag{44.4}$$

将此表达式代入[44.1]式，得出 $K(x, x', t)$的二重积分，在其被积函数中可对 n 求和．因此，不难利用[44.2]式计算这个二重积分．结果为

$$K(x, x', t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi i\sin\tau}}\exp\left[i\frac{(x^2+x'^2)\cos\tau-2xx'}{2\sin\tau}\right].$$

根据所求得的K 的积分，也能直接导出完全性关系

$$K(x, x', 0)=\sum_n h_n^*(x')h_n(x)=\delta(x-x').$$

§ 45. 角动量

1. 证明角动量的分量在球坐标中可表示为

$$P_1+iP_2=e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),$$

$$P_1-iP_2=e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

此外，证明：把这些算符作用于 $Y_{l,m}(\theta,\varphi)=P_l^m e^{im\varphi}$ 而得出

$$(P_1+iP_2)Y_{l,m}(\theta,\varphi)=-Y_{l,m+1}(\theta,\varphi),$$

$$(P_1-iP_2)Y_{l,m}(\theta,\varphi)=-(l+m)(l-m+1)Y_{l,m-1}(\theta,\varphi).$$

关系式（参见 §43）

$$P_l^m=(-1)^m\frac{(l+m)!}{(l-m)!}P_l^{-m} \qquad [45.1]$$

能用来证明第二个公式.

2. 用归一化积分 $\int\{P_l^m(x)\}^2\mathrm{d}x$（参见 §43）的值应能计算矩阵元

$$(l,m-1|P_1+iP_2|l,m) \text{和} (l,m-1|P_1-iP_2|l,m).$$

验证 P_1-iP_2 是 P_1+iP_2 的厄密共轭.

3. 利用代换 $t\to-(1-x^2)/t$，借助于复积分表达式

$$P_l^m(x)=(1-x^2)^{m/2}\frac{(-1)^l}{2^l l!}\cdot\frac{(l+m)!}{2\pi i}\oint\frac{\{1-(x+t)^2\}^l}{t^{l+m+1}}\mathrm{d}t$$

验证[45.1]式. 这里重要的是，不仅 $l\pm m$ 是整数，而且 l 也是整数. [被积函数在 $t=1-x$ 和 $t=-(1+x)$ 处的正则性.]

§ 46. 分波

1. 若波动方程

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rv_k)+k^2v_k-\frac{2m}{\hbar^2}V_1(r)\cdot v_k=0$$

中的势 $V_l(r)$ 在大 r 处比 $1/r$ 减少得快，则波函数 v_k 在大 r 处的渐近行为由下式给出

$$v_k(r) \sim \frac{C}{r} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right); \qquad [46.1]$$

在不受力作用的情况，$(2m/\hbar^2)V_l(r) = l(l+1)/r^2$，我们有 $\delta_l = 0$。证明：按照

$$\int_0^\infty v_k v_{k'} r^2 \mathrm{d}r = \delta(k'-k) \qquad [46.2]$$

的归一化与要求

$$C = \sqrt{2/\pi} \qquad [46.3]$$

是等价的．为此，利用[46.2]式的如下形式

$$\lim_{R\to\infty} \int_0^R r^2 \mathrm{d}r \int_{k-(\Delta k/2)}^{k+(\Delta k/2)} v_k v_{k'} \,\mathrm{d}k' = 1, \qquad [46.4]$$

并利用由连续性方程导出的关系式

$$\int_0^R v_k v_{k'} r^2 \mathrm{d}r = \frac{1}{k'^2 - k^2}\Big\{(rv_{k'})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(rv_k) - (rv_k)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(rv_{k'})\Big\}_{r=R}. \qquad [46.5]$$

必须在对 k' 的积分后再取 $R\to\infty$ 的极限．

2. 证明：若给[46.1]式中的位相加上 $\ln r$ 级的修正，则对库仑势的情况，上述结果也是正确的．

3. 对于在抛物线坐标中库仑势的波函数，计算坐标 $z=(1/2)(\lambda_1-\lambda_2)$[[18.66]式(以长度 a_0 为单位表示的)]的对角矩阵元．为此，可以利用拉盖尔多项式 $L_{m+n_i}^m$ 的母函数以及在 §17 中已算出的归一化积分(参见[17.42]式)。

§ 47. 对称陀螺

讨论具有转动惯量 $A=B$ 和 C 的对称陀螺的本征值问题．用欧勒角 ϑ, φ, χ 和它们的正则共轭动量 p_ϑ, p_φ, p_χ 表示的经典力学

哈密顿函数为

$$H=\frac{p_\vartheta^2}{2A}+\frac{(p_\varphi-\cos\vartheta p_\chi)^2}{2A\sin^2\vartheta}+\frac{p_\chi^2}{2C}.$$

它导致波动方程

$$\frac{1}{2A}\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{2A}\frac{1}{\sin^2\vartheta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}-\cos\vartheta\frac{\partial}{\partial\chi}\right)^2\psi$$

$$+\frac{1}{2C}\frac{\partial^2\psi}{\partial\chi^2}=-\frac{E}{\hbar^2}\psi.$$

试解

$$\psi=\theta(\vartheta)\exp[i(m\chi-m'\varphi)]$$

引出微分方程

$$\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\vartheta}\right)-(m'^2+m^2+2\cos\vartheta mm'-\lambda\sin^2\vartheta)\theta=0,$$

[47.1]

式中

$$E=\frac{\hbar^2}{2}\left\{\frac{\lambda}{A}+m^2\left(\frac{1}{C}-\frac{1}{A}\right)\right\}. \qquad [47.2]$$

代入 $x=(1-\cos\vartheta)/2,\ 1-x=(1+\cos\vartheta)/2$, 由[47.1]式我们得到

$$x(1-x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{x(1-x)\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}x}\right\}+\{-\lambda x^2-\frac{1}{4}(m+m')^2+(\lambda$$

$$+mm')x\}\theta=0. \qquad [47.3]$$

利用

$$\theta_{m,m'}=x^{(m+m')/2}(1-x)^{(m-m')/2}\cdot f_{m,m'}, \qquad [47.4]$$

则 f 的方程是超几何微分方程

$$x(1-x)f''+\{\gamma-(\alpha+\beta+1)x\}f'-\alpha\beta f=0, \qquad [47.5]$$

并有

$$\left.\begin{aligned}\alpha+\beta&=2m+1\\ \alpha\beta&=-\lambda+m(m+1)\\ \gamma&=m+m'+1\end{aligned}\right\}. \qquad [47.6]$$

若 γ 既不为零，也不是负整数，则方程[47.5]的一个在 $x=0$ 为正则的积分由下列级数给出

$$F(\alpha,\beta,\gamma,x)=1-\frac{\alpha}{1}\cdot\frac{\beta}{\gamma}x+\frac{\alpha(\alpha+1)}{1\cdot 2}\cdot\frac{\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}x^2+\cdots.$$

这里，我们允许 m 和 m' 具有正负整数和半整数值，但要使 $m\pm m'$ 为整数。

证明：对 γ 的正负整数值成立的解由下列积分给出

$$\bar{F}(\alpha,\beta,\gamma,x)=\frac{\exp[i\pi\alpha]}{2\pi i}\cdot\frac{\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}\oint_C t^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}(1-tx)^{-\beta}dt.$$

积分路线 C 以正方向围绕点 0 和 1，但是点 $1/x$ 在 C 之外。

我们有

$$F=\Gamma(\gamma)\bar{F}(\alpha,\beta,\gamma,x),\qquad \gamma=1,2,\cdots.$$

λ 的本征值来自如下的要求：$\bar{F}$ 为一多项式，而[47.4]式是有限的，这意味着 α 为一负整数或零。（交换 α 和 β 并不得出新解。）证明：仅当

$$\lambda=j(j+1) \tag{47.7}$$

（按定义 j 为正），而且

$$j\pm m \text{ 和 } j\pm m' \text{ 为整数并且不为负值} \tag{47.8}$$

时，才确如上述。

于是我们有

$$\alpha=-j+m,\quad \beta=j+m+1,\quad \gamma=m+m'+1. \tag{47.9}$$

通过将 $t=1/s$ 和 $t=(1/x)(x-s)/(1-s)$ 代入积分表达式，证明：当 $f_{m,m'}=\bar{F}_{m,m'}$ 时，[47.4]式中的函数 $\theta_{m,m'}$ 满足

$$\theta_{-m,-m'}=(-1)^{m+m'}\cdot\frac{(j+m')!(j+m)!}{(j-m')!(j-m)!}\cdot\theta_{m,m'}, \tag{47.10}$$

并推导

$$\bar{F}=\frac{(j-m)!}{(j+m)!(j+m')!}(-1)^{m+m'}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{j+m}\{x^{j-m'}(1-x)^{j+m'}\}$$
$$=\frac{1}{(j+m')!}x^{-m'-m}(1-x)^{m'-m}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{j-m}\{x^{j+m'}(1-x)^{j-m'}\}. \qquad [47.11]$$

此外，证明：

$$(1-x)^{\gamma-\alpha-\beta}F(\gamma-\beta,\gamma-\alpha,\gamma,x)=F(\alpha,\beta,\gamma,x)$$

意味着

$$\theta_{m,m'}=\theta_{m',m}. \qquad [47.12]$$

最后，计算归一化积分

$$N=\int_0^1\{\theta_{m,m'}(x)\}^2\mathrm{d}x=\int_0^1 x^{m+m'}(1-x)^{m-m'}(\bar{F})^2\mathrm{d}x. \qquad [47.13]$$

在这一表达式中，例如，$(\bar{F})^2$可用由[47.11]式给出的 $\bar{F}$ 的两个表达式的积来代替；然后可进行分部积分，并可应用第一类欧勒积分

$$\int_0^1 x^{p-1}(1-x)^{q-1}\mathrm{d}x=\frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)};\qquad p>0, q>0. \qquad [47.14]$$

补 充 书 目

一般的

H. A. Kramers, *Quantum Mechanics* (North Holland, Amsterdam, 1957).

P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th ed. (Oxford University Press, London, 1958)(有中译本，《量子力学原理》，陈咸亨译，科学出版社，1959).

E. C. Kemble, *The Fundamental Principles of Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1937); corrected republication by Dover Publications. Inc. (New York, 1958).

D. Bohm, *Quantum Theory* (Prentice-Hall, New York, 1951).

L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 2nd ed. (McGraw-Hill, New York,

1955).

D. I. Blochinzew, *Grundlagen der Quantenmechanik* (Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1953).（有中译本,《量子力学原理》分上,下两册 叶蕴理,金星南译,高等教育出版社,1956 年）.

A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien*, vol. 2 (Wellenmechanischer Ergänzungsband), 2nd ed. (Vieweg, Braunschweig, 1944); reprinted by Frederick Ungar Publishing Co. (New York, 1953).

L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory* (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1958).

A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North Holland, Amsterdam, 1961), vols. 1 and 2.

专门的

L. DE Broglie, *La Mecanigue Ondulatoire* (Gauthier-Villars, Paris, 1928).

W. Pauli, "*Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*", 论文载入 *Encyclopedia of Physics*, vol. 5. Part 1 (Springer, Berlin, 1958). 这篇论文不是导论.

H. A. Bethe and E. E. Salpeter, "*Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Systems*", 论文载入 *Encyclopedia of Physics*, vol. 35 (Springer, Berlin, 1957).

E. Schrödinger. *Abhandlungen Zur Wellenmechanik* (Leipzig, 1928).

M. Born and P. Jordan, *Elementare Quantenmechanik* (Springer, Berlin, 1930). 这篇论述是纯粹代数的.

J. Von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, 1955).

G. Ludwig, *Die Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer, Berlin, 1954).

J. M. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1968).

基本原理和认识论方面的讨论

W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory* (University of Chicago Press, Chicago, 1930); reprinted by Dover

Publications, Inc. (New. York, 1949).

N. Bohr, *Atomic Theory and the Description of Nature* (Cambridge University Press, London, 1934).

N. Bohr, "*Discussions With Einstein on Epistemological Problems in Atomic Physics*"论文载入 *Albert Einstein: Philosopher-Scientist*, edited by P. A. Schilpp (Tudor, New York, 1951).

H. Reichenbach, *Philosophic Foundations of Quantum Mechanics* (University of California Press, Berkeley, 1944). (有中译本,《量子力学的哲学基础》侯德彭译,商务印书馆, 1965.)

Dialectica, vol. 2, number 3/4 (Neuchâtel, Switzerland, 1948).

W. Heiseberg, "*The Development of the Interpretation of the Quantum Theory*", 论文载入 *Niels Bohr and the Development of Physics*, edited by W. Pauli (McGraw-Hill, New York, 1955).

Institut International de Physigue Solvay, Cinguième Conseil de Physigue: *Electrons et Photons* (Paris, 1928).

Contributions by A. Einstein, E. Schrödinger, W. Pauli, and Others in *Louis de Broglie physicien et penseur* (Albin Michel, Paris, 1953).

附录　英译本编者评注

[A-1]　(§4)本节提出的问题是构成量子论历史中最吸引人的方面之一.这就是量子论的几率本性是否和量子论给出自然界的完备描述这一要求相容的问题. 在1927年第五次索耳未会议 (Fifth Solvay congress)上曾热烈讨论过这个问题,结果是“哥本哈根解释”获胜了. 后者是这相容性中的一个信条. 然而,由德布罗意,爱因斯坦,薛定谔以及后来玻姆辩护的相反观点是相信完备理论应该是以决定论为基础的.

泡利在这一节中谈到的“直观图象”暗中指的是德布罗意的“导波”，它是“决定论方案”中“隐变量”的一种特殊实例. 在献给德布罗意六十寿辰的《路易·德·布罗意,物理学家和思想家》(Albin Michel, 巴黎,1953)一书中，泡利的题为《关于量子力学中隐参量的和导波理论的评论》[1]的论文里,最清楚地揭示了这个问题. 他写道(第35页):“在1927年索耳未会议上,与德布罗意讨论了这个理论,这使我很高兴. 不久以后，为了海森伯和玻尔的量子力学的并协解释，德布罗意放弃了它[2]，其理由在他的《波动力学导论》(1929)中详尽地阐述了”. 后来，在第37页上(指上述书中的页数——中译者注),泡利从普遍观点出发去讨论“在借助于一些隐参量，而使量子力学成为决定论方案来完成量子力学的尝试;导波理论只是一个特殊的例子”.并且他推断(第42页):“在物理理论的诠释和论证中，有物理学的理由(这与哲学没有关系)使我相信,在并协概念的基础上解释波动力学是唯一可接受的.虽然在相对论范畴中还远不能认为量子力学的状态是肯定的,但我相信,这个理论的发展只是使我们更加不可能作出决定论的和因果的解释”.

在同一本书中,爱因斯坦的论文《关于一些基本概念的绪论》[3] 里最清楚

---

①　重印在《*Collected Scientific Papers by Wolfgang Pauli*》Interscience, New York 1964 vol. I. pp. 1115.——中译者注

②　指的是导波理论.——中译者注

③　参看,许良英等编译《爱因斯坦文集》第一卷第536页至540页，商务印书馆1977年.——中译者注

地表达了这节中提到的他的信念. 他(第六页)写道:“象一个物理系统的“真实状态”这样的事物是有的, 它不依赖于任何一个观察或测量而客观地存在着, 并且原则上能用物理的表达方法来描述.”并且在第八页:“因此, 人们意识到不得不把用波函数Ψ对系统的描述看作是对真实状态的不完备的描述.”

关于隐变量的较晚近的讨论, 参看 J. S. Bell, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 447 (1966). 关于一个新近实验上的试验, 参看 S. J. Freedman 和 J. F. Clauser, *Phys. Rev. Letters* **28**, 938(1972).

[A-2] (§8)$\delta(x)$ 和所有它的导数都是“广义慢增函数” (tempered distributions).

一个广义函数 (distribution) 定义为具有界支集无限次可微函数 $\varphi(x)$ 的一个线性连续泛函 $F[\varphi]$. 这意味着

$$F[\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2]=\lambda_1F[\varphi_1]+\lambda_2F[\varphi_2],$$

$$\lim_{j\to\infty}F[\varphi_j]=F[\varphi],$$

对任何这样的函数列 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots$, 使得 $\lim\limits_{j\to\infty}\varphi_j=\varphi$, 并且 $\varphi(x)$的非零值全部都包含在x的有限区域内.

广义慢增函数是用函数 $\psi(x)$来定义的, 它的所有导数 ψ^{n}渐近地强烈趋近于零, 即对任何非负的 l 和 m,

$$\lim_{|x|\to\infty}|x|^l\psi^{(m)}(x)=0.$$

一个在无限远足够缓慢地增加的局部可积函数 $f(x)$(即, 存在着正数 A 和 α 使得当$|x|\to\infty$ 时, $|f(x)|\leqslant Ax^{\alpha}$)定义一个广义慢增函数

$$f[\psi]=\int f(x)\psi(x)\mathrm{d}x.$$

两个局部可积函数 f_1 和 f_2, 如果除了在零测度集上, $f_1-f_2=0$, 则它们定义同一个广义函数. 所以, 在§8末尾中举出的狄拉克函数 $\delta(x)$的全部表象定义同一个广义函数

$$\delta[\psi]=\int\delta(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\psi(0).$$

如果一个局部可积函数是可微的, 它的广义函数的导数定义为

$$f'[\psi]=\int f'(x)\psi(x)\mathrm{d}x=-\int f(x)\psi'(x)\mathrm{d}x=-f[\psi'].$$

在量子力学中, 一个有连续谱的可观察算符的本征函数 f 和一般波函数

ψ 的标积$\int f(x)\psi(x)dx$定义一个广义慢增函数$f[\psi]$，因为任何波函数$\psi(x)$都是平方可积的。

对于广义函数性质的简要说明，参看，例如 A. Messiah, *Quantum Mechanics*(North Holland, Amsterdam, 1961)第一卷，附录 A.

[A-3] （§§33, 39）不但在电子自旋而且在核自旋的历史上，泡利的作用都是极其重要的。早在 1924 年他就提出原子核的"合角动量"的假设了。的确，在《自然科学》(*Naturwiss*, **12**, 741(1924))上，他用现在称为超精细相互作用的术语讨论了"某些谱线的伴线"；他写道："这个能量差因此可理解为由于原子核的复合结构而引起的，并且可以假设，一般说来，原子核具有不为零的合角动量"。

值得注意的是，虽然，在《物理学期刊》[*Z. Physik* **31**, 373(1925)(1924年 12 月 2 日交稿)]泡利注意到了电子量子态的"奇异的二值性"，然而这时他还不准备接受电子的角动量观念。这个结论是建立在"碱金属光谱双重结构"(自旋-轨道裂距)和"违背拉莫尔定理"(反常塞曼效应)上的。在上述论文中，他写道："按照这个观点，碱金属光谱双重结构，以及违背拉莫尔定理的出现，是由于一种特有的、经典方法不能描述的发光电子量子理论性质的二值性。"泡利在他的《1946 年诺贝尔奖演讲》中（重印在"*Collected Scientific Papers by Wolfgang Pauli*, Interscience, New York, 1964, vol. 2, p. 1080)解释他在接受电子自旋时的犹豫原因如下："虽然起先我由于这个概念的经典力学的特性而强烈地怀疑它的正确性，通过托马斯关于双重线裂距量值的计算[L. H. Thomas, *Nature* **117**, 514(1926)和*Phil. Mag.* **3**, 1(1927)，并对照 J. Frenkel, *Z. Phys.* **37**, 243(1926)]，最后我转变过来了…"。

的确因为相差了这个托马斯因子2，泡利不相信自旋-轨道裂距的克朗尼格(Kronig)的计算(未发表，1925 年初)。有关这个科学史上微妙的插曲的详情，在W. 泡利纪念集《20世纪理论物理》(Interscience New York 1960)中 R. 克朗尼格和 B. L. 范德瓦尔登的论文中可以找到。

关于核自旋的历史，在 *Physics Today* **14**, No. 6 p. 18(1961), S. A. 古德斯密特(Goudsmit)的论文中可以找到很有趣的叙述；他写道："多年来，每当我遇见泡利时，他总神秘地说他"宁愿不被援引"，只是在三十年代后期，我才弄清楚他是指什么说的。"

[A-4]（§38）这只是对与自旋无关的力才是正确的。在这种情况下，散

射不引起自旋的翻转，因而反平行的全同粒子在碰撞中仍然是不可区别的。

［A-5］（§40.2）玻恩在 *Dan. Mat. Fys. Medd.* **30**, No. 2(1955)中对这问题作了极详尽的评述。这篇文章是献给尼尔斯·玻尔七十寿辰的。

索　　引

（汉－英）

一—三划

四 划

五 划

六　划

七 划

八　划

九 划

十 划

十一划

十 二 划

十 三 划

十四—十六划